Agilent Cerity Networked Data System für die Pharmazeutische QA/QC

Konzepte

Grundlagen des Cerity-Systems

Agilent Technologies

Hinweise

© Agilent Technologies, Inc. 2003

Die Vervielfältigung, elektronische Speicherung, Anpassung oder Übersetzung dieses Handbuchs ist gemäß den Bestimmungen des Urheberrechtsgesetzes ohne vorherige schriftliche Genehmigung durch Agilent Technologies verboten.

Handbuch-Teilenummer

G4000-92023

Ausgabe

5/2003

Gedruckt in Deutschland

Agilent Technologies Deutschland GmbH
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn, Deutschland

Microsoft ® is a U.S. registered trademark of Microsoft Corporation.

Softwareversion

Dieses Handbuch gilt für die Versionen A.02.xx der Software Agilent Cerity Networked Data System für die Pharmazeutische QA/QC, wobei xx eine Zahl von 00 bis 99 ist und auf geringfügige Änderungen der Software hinweist, die die technische Richtigkeit dieses Handbuchs nicht beeinflussen.

Gewährleistung

Agilent Technologies behält sich vor, die in diesem Handbuch enthaltenen Informationen jederzeit ohne Vorankündigung zu ändern. Agilent Technologies übernimmt keinerlei Gewährleistung für die in diesem Handbuch enthaltenen Informationen, insbesondere nicht für deren Eignung oder Tauglichkeit für einen bestimmten Zweck. Agilent Technologies übernimmt keine Haftung für Fehler, die in diesem Handbuch enthalten sind, und für zufällige Schäden oder Folgeschäden im Zusammenhang mit der Lieferung, Ingebrauchnahme oder Benutzung dieses Handbuchs. Falls zwischen Agilent und dem Benutzer eine schriftliche Vereinbarung mit abweichenden Gewährleistungsbedingungen hinsichtlich der in diesem Dokument enthaltenen Informationen existiert, so gelten diese schriftlich vereinbarten Bedingungen.

Technologielizenzen

Die in diesem Dokument beschriebene Hardware und/oder Software wird/werden unter einer Lizenz geliefert und dürfen nur entsprechend den Lizenzbedingungen genutzt oder kopiert werden.

Nutzungsbeschränkungen

Wenn Software für den Gebrauch durch die US-Regierung bestimmt ist, wird sie als "kommerzielle Computer-Software" gemäß der Definition in DFAR 252.227-7014 (Juni 1955), als "kommerzielle Komponente" gemäß der Definition in FAR 2.101(a), als "nutzungsbeschränkte Computer-Software" gemäß der Definition in FAR 52.227-19 (Juni 1987) (oder einer vergleichbaren Agentur- oder Vertragsregelung) ausgeliefert und lizensiert. Nutzung, Vervielfältigung oder Weitergabe von Software unterliegt den standardmäßigen Bestimmungen für kommerzielle Lizenzen von Agilent Technologies. US-Regierung und -Behörden (außer Verteidigungsministerium) erhalten keine Rechte, die über die Rechte an "nutzungsbeschränkter Computer-Software" gemäß FAR 52.227-19(c)(1-2) (Juni 1987) hinausgehen. Zur US-Regierung zählende Benutzer erhalten keine Rechte, die über die Rechte an "nutzungsbeschränkter Computer-Software" gemäß FAR 52.227-14 (Juni 1987) oder DFAR 252.227-7015 (b)(2) (November 1995) hinausgehen, soweit in irgendwelchen technischen Daten anwendbar.

Sicherheitshinweise

VORSICHT

Ein **VORSICHT**-Hinweis macht auf Arbeitsweisen, Anwendungen o. ä. aufmerksam, die bei falscher Ausführung zur Beschädigung des Produkts oder zum Verlust wichtiger Daten führen können. Wenn eine Prozedur mit dem Hinweis **VORSICHT** gekennzeichnet ist, dürfen Sie erst fortfahren, wenn Sie alle angeführten Bedingungen verstanden haben und diese erfüllt sind.

WARNUNG

Ein WARNUNG-Hinweis macht auf Arbeitsweisen, Anwendungen o. ä. aufmerksam, die bei falscher Ausführung zu Personenschäden, u. U. mit Todesfolge, führen können. Wenn eine Prozedur mit dem Hinweis WARNUNG gekennzeichnet ist, dürfen Sie erst fortfahren, wenn Sie alle angeführten Bedingungen verstanden haben und diese erfüllt sind.

In diesem Leitfaden

Der Konzeptleitfaden erläutert die Grundzüge des Cerity Networked Data System (NDS) für die pharmazeutische QA/QC, damit Sie:

- die Cerity-Module optimal einzusetzen verstehen
- die Online-Hilfe möglichst effizient nutzen können.

1 Übersicht über Ihr Cerity NDS für pharmazeutische QA/QC

Hier erfahren Sie, wie die Cerity-Module zusammenarbeiten und die Einhaltung geltender Standards und Bestimmungen zu gewährleisten.

2 Grundlagen von Cerity für pharmazeutische QA/QC

Hier werden Ihnen die Werkzeuge für die Analyse von Proben, das Einrichten von Methoden und das Erstellen von Berichten vorgestellt.

3 Konzepte für die Probenanalyse

Hier werden Ihnen die Konzepte vorgestellt, die Ihnen die Eingabe, Analyse und Ergebnisprüfung von Proben und Sequenzen ermöglichen.

4 Konzepte für die Methodenerstellung

Hier lernen Sie die Konzepte zur Einrichtung von Methoden kennen.

5 Anwendungen zur Verwaltung und Systemwartung

Hier lernen Sie die Verwaltungstools für das Einrichten und die Wartung des Cerity für pharmazeutische QA/QC kennen.

Inhalt

1 Übersicht über Ihr Cerity NDS für pharmazeutische QA/QC 7

Welches System haben Sie? 8

Wie arbeiten die Cerity NDS Module zusammen? 11

Wie erleichtert Cerity NDS die Einhaltung geltender Bestimmungen? 17

2 Grundlagen von Cerity für pharmazeutische QA/QC 21

Die vier Ansichten - wo die meisten Arbeitsschritte erfolgen 22

Wichtige Arbeitswerkzeuge 26

Online Help (Online-Hilfe) 29

Probenanalyse 31

Datenbanksuche 37

Methodenbearbeitung 39

Speicherungen in der Datenbank 40

Method Setup (Methodenerstellung) 44

3 Probenanalyse 49

Eingabe von Probe und Sequenz 51

Vorbereitung auf den Analysenlauf 54

Planung und Verfolgung von Analysenläufen 55

Ergebnisüberprüfung 58

Annahme/Ablehnung von Ergebnissen 64

Neuauswertung von Kalibriermethoden 67

Versionen der Ergebnisse und Kalibriertabellen 73

Versionsführung und Nachvollziehbarkeit bei Sequenzen 78

4 Methodenerstellung 95

Cerity für die pharmazeutische QA/QC - Methodenkonzepte 97

Cerity für die pharmazeutische QA/QC - Methodenabschnitte 102

Calibration (Kalibrierung) 108

Custom calculations (Benutzerdefinierte Berechnungen) 115

Layout der Datenüberprüfung 132

Reporterstellung 135

5 Verwaltungs- und Wartungsprogramme 147

Schritte nach erfolgter Installation 148

Cerity NDS Systemverwaltung und Wartung 154

1
Übersicht über Ihr Cerity NDS für pharmazeutische QA/QC

Welches System haben Sie? 8
Wie arbeiten die Cerity NDS Module zusammen? 11
Wie erleichtert Cerity NDS die Einhaltung geltender Bestimmungen? 17

Dieses Kapitel bietet einen Überblick über alle Komponenten Ihres Cerity Networked Data System für die pharmazeutische QA/QC und zeigt, wie sie zusammenspielen, um Ihnen die Erledigung Ihrer Aufgaben und die Einhaltung geltender Standards und Bestimmungen zu erleichtern.

Sie erfahren, wie die drei wichtigsten Komponenten - Datenbankserver, Akquisitons-Kontroller und Review Client - zur Erfüllung der Anforderungen Ihres Labors zusammenwirken.

Welches System haben Sie?

Ihr Cerity NDS System ist entweder ein Professional System oder ein Client/Server-System.

Professional System (Agilent G4000AA)

Das Cerity NDS Professional System läuft auf einer Windows Workstation.

Obwohl das System mit fünf named user Benutzerlizenzen für Oracle ausgeliefert wird, kann jeweils immer nur ein Cerity NDS Benutzer das System verwenden, nicht mehrere gleichzeitig.

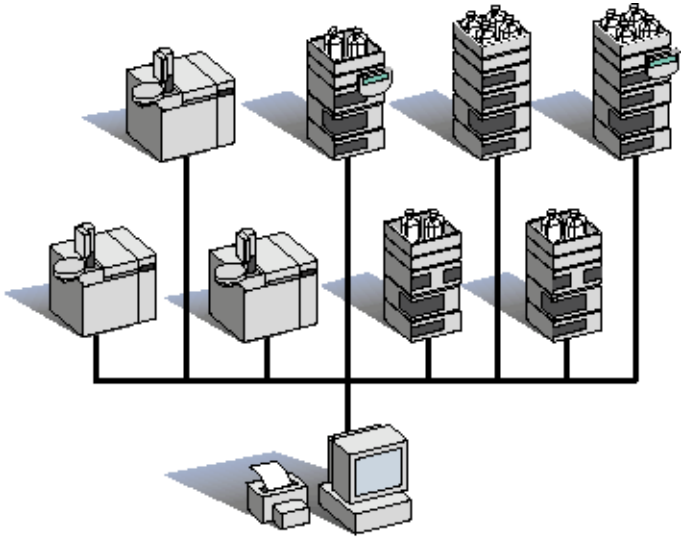


Abb. 1 Cerity NDS Professional System

Client/Server-System (Agilent G4001AA)

Die Module Ihres Cerity NDS Client/Server-Systems werden auf eigenen Microsoft® Windows Workstations installiert. Der Verband enthält alle für das Cerity NDS Client/Server-System konfigurierten Netzwerkgeräte wie Analysengeräte, Drucker und Clients.

Sie können so viele lizenzierte Benutzer einrichten, wie im Cerity NDS Verband benötigt werden. Cerity NDS Benutzer und Gerätesteuerung werden separat lizenziert. Für jeden benannten Benutzer im System ist eine Oracle-Lizenz erforderlich. Im Client/Server-System sind bereits fünf benannte anwendungsspezifische Benutzerlizenzen für Oracle enthalten.

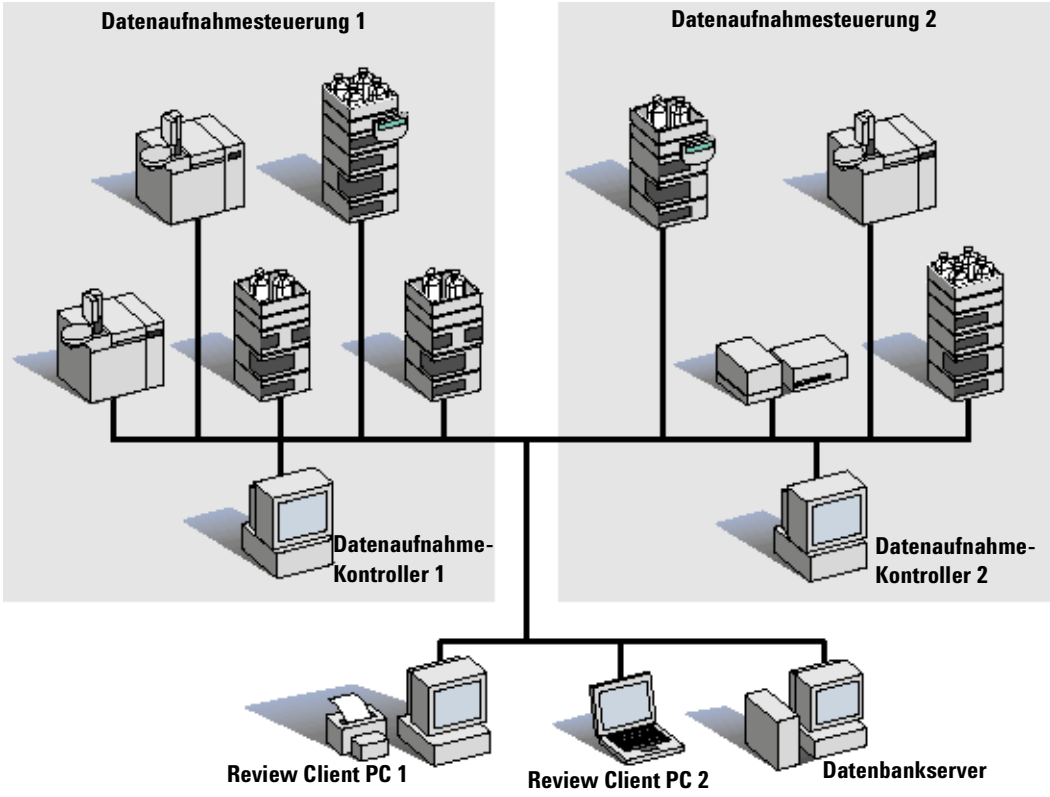


Abb. 2 Cerity NDS Client/Server-System

Wie arbeiten die Cerity NDS Module zusammen?

Die Cerity NDS Komponenten bilden den gemeinsamen Rahmen für die Aufnahme, Analyse, Neubearbeitung und Speicherung von Daten:

- Review Client zur Datenanalyse, Methoden- und Reporterstellung, Verwaltung und Wartung
- Datenaufnahmesteuerung zur Datenaufnahme, Analyse und Neubearbeitung
- Neubearbeitungsserver für die Datennachbearbeitung
- Datenbankserver zur Datenspeicherung.

Das Cerity NDS Professional System betreibt den Cerity NDS Datenbankserver, die Datenaufnahmesteuerung, den Review Client und die relationale Oracle-Datenbank auf einer einzigen Microsoft Windows Workstation.

Das Cerity NDS Client/Server-System verteilt die Cerity NDS Komponenten auf die zugewiesenen Server oder Workstations. Die Cerity NDS Komponenten führen auf beiden Systemen die gleichen Aufgaben aus.

Das System ist vollständig skalierbar.

Probenanalyse, Methodeneinrichtung und Reporterstellung

Weitere Informationen zu den Grundlagen der pharmazeutischen QA/QC-Anwendung finden Sie in Kapitel 2, "Grundlagen von Cerity für pharmazeutische QA/QC".

Der *Review Client* stellt die Benutzeroberfläche der Anwendung für Ihr Cerity NDS zur Verfügung.

Mit dieser Anwendung kann der Benutzer Proben analysieren, Methoden erstellen und Reports erzeugen.

Die Cerity NDS Datenbank speichert alle Rohdaten, Zwischenwerte und die Ergebnisse der Anwendung Cerity für pharmazeutischen QA/QC.

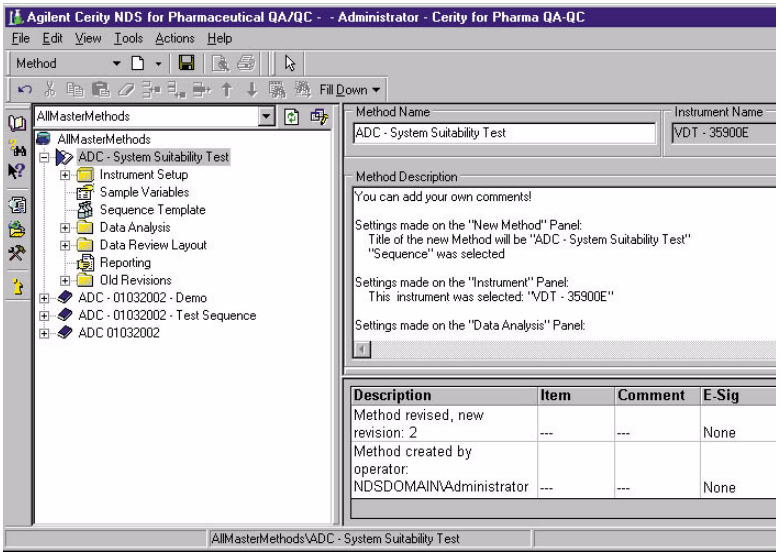


Abb. 3 Cerity für die pharmazeutische QA/QC

Weitere Informationen zur Probenanalyse finden Sie in Kapitel 3, "Probenanalyse".

Probenanalyse Mit Cerity für die pharmazeutische QA/QC können Probenlieferanten Proben und Sequenzen eingeben, mit zuvor festgelegten Methoden analysieren und die Ergebnisse überprüfen. Der Analytiker kann die Ergebnisse, soweit berechtigt, nachprüfen und nachbearbeiten, der Laborleiter kann die Befunde elektronisch unterschreiben.

Eine genauere Beschreibung der Methoden- und Reporterstellung finden Sie in Kapitel 4, "Methodenerstellung".

Methodenerstellung Mit Cerity für die pharmazeutische QA/QC können Sie Methoden einschließlich Geräteparameter, Datenanalyseparameter, Angaben zur Ergebnisdarstellung und dem Reporttyp erstellen. Die Methoden können auch benutzerdefinierte Probenvariablen, Sequenzvorlagen, eigene Berechnungsformeln und Grenzwertspezifikationen enthalten.

Die Methoden in Cerity für die pharmazeutische QA/QC enthalten die Parameter, das Aussehen und die Berechnungen Ihrer Monographien oder SOPs zur Analyse. Normalerweise werden sie nur einmal erstellt. Analytiker, Probenlieferanten und Techniker arbeiten mit diesen vordefinierten Methoden.

Reporterstellung Wenn Sie eine Methode erstellen oder eine Probe eintragen, wählen Sie den Reporttyp aus, der bei der Bearbeitung erzeugt werden soll. Wenn Sie eine Probe oder eine Sequenz analysieren, erzeugt das System einen Report auf Basis der für diesen Reporttyp ausgewählten Reportvorlage.

Die *Reportvorlage* enthält das Format für die Felder und Tabellen in Ihrem Report. Reportvorlagen rufen die Daten für jede Probe, mehrere Proben oder Sequenzen aus der Datenbank ab.

Sie können entweder die Standardreportvorlagen benutzen, die bereits dem jeweiligen Reporttyp zugeordnet sind, oder andere mit dem System ausgelieferte Reportvorlagen. Berechtigte Benutzer können die Reportvorlagen auch mit dem *Reportvorlageneditor* erstellen und bearbeiten.

Mit dem *Cerity Report Viewer* können die Benutzer Berichte einsehen und drucken.

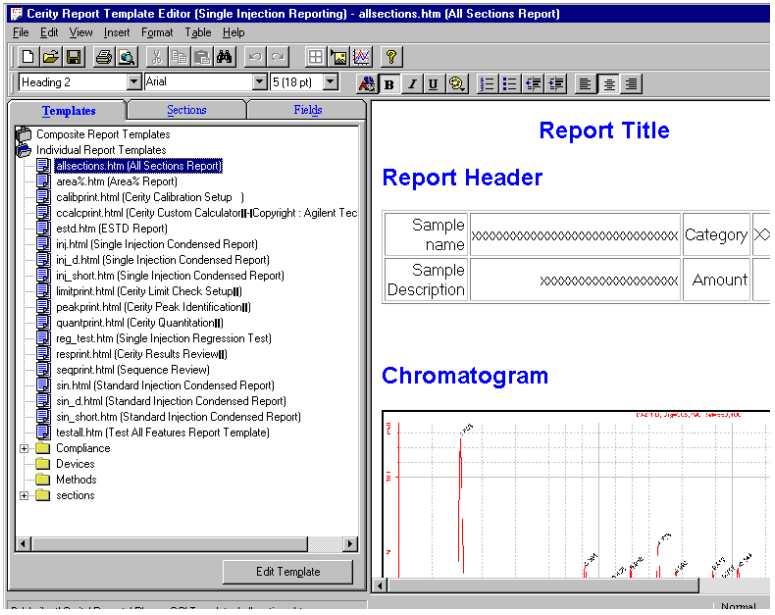


Abb. 4 Reportvorlageneditor

Verwaltung und Systemwartung

Der Cerity *Review Client* stellt dem Cerity NDS Administrator die Benutzeroberfläche zur Systemverwaltung zur Verfügung.

Cerity NDS Software Administration Mit dieser Anwendung kann der Systemadministrator Lizenzen, Anmeldegenehmigungen, Aufgaben, Benutzerrechte, Auditfunktionen und systemweite Formate einrichten.

Compliance Mit dieser Anwendung kann der Systemadministrator oder Laborleiter die Installation des Cerity NDS überprüfen und Qualifizierungstests für das Datensystem und angeschlossene Geräte ausführen. Diese Anwendung wird separat lizenziert.

Archive and Restore Mit diesem Dienstprogramm können berechtigte Systemadministratoren Daten der Datenbank archivieren, wiederherstellen oder löschen.

Password Changes Mit diesen beiden Dienstprogrammen kann der Systemadministrator Passwörter (für Datenbank- und Service-Zugang) für das System ändern.

Database Resolve Dieses Dienstprogramm prüft, ob Namen in der Datenbank doppelt vorkommen, nachdem Daten aus einer anderen Datenbank eingelesen wurden.

Weitere Informationen zu den Cerity NDS Verwaltungs- und Wartungsanwendungen finden Sie in Kapitel 5, "Verwaltungs- und Wartungsprogramme".

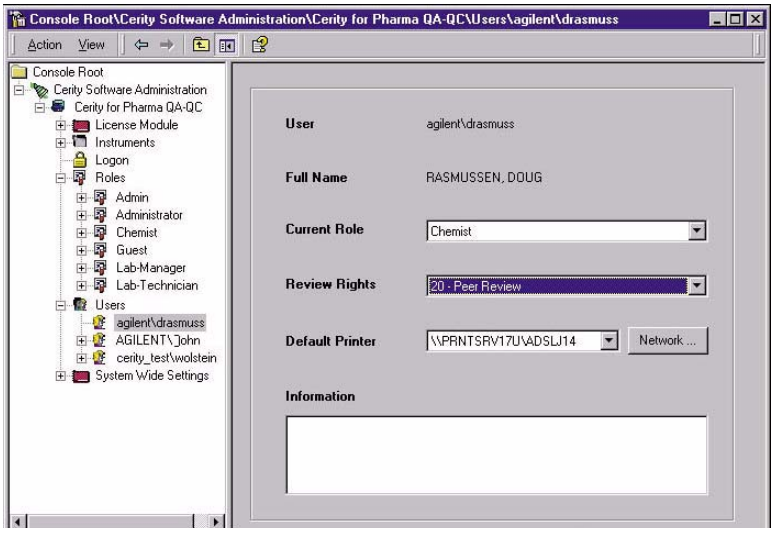


Abb. 5 Die Anwendung Cerity NDS Software-Administration

Datenaufnahme und Auswertung

Die *Datenaufnahmesteuerung* von Cerity sorgt auf einer Windows Workstation für die Aufnahme der Daten und Steuerung der Geräte. Die Datenaufnahme beginnt mit der Abfrage der Geräteparameter vom *Datenbankserver* durch die Datenaufnahmesteuerung.

Der *Review Client* stellt die Benutzeroberfläche zur Eingabe von Methodenparametern zur Verfügung, mit denen die Datenaufnahmesteuerung die Geräte steuert. Die Datenaufnahmesteuerung kann ebenfalls die Datenanalyse und Neubearbeitung übernehmen.

Neubearbeitung

Cerity NDS benutzt einen Zufallsalgorithmus, um einem Client eine Netzwerkstation als “Nachbearbeitungsserver” zuzuweisen. Die Zufallsauswahl gewährleistet eine gleichmäßige Arbeitsbelastung im System unter der Annahme, dass alle Clients eine ähnliche Arbeitsbelastung erzeugen. Diese Arbeitsverteilung vermeidet unnötige Verzögerungen, wenn viele Benutzer gleichzeitig Ergebnisse überarbeiten.

Informationen zum Einrichten eines Neubearbeitungsservers finden Sie im Im Installationshandbuch.

Datenaufnahmesteuerungen funktionieren auch als Neubearbeitungsserver. Sie können aber auch einen bestimmten Neubearbeitungsserver einem einzelnen Client zuweisen. Agilent empfiehlt, für jeweils 10 parallel arbeitende Benutzer einen eigenen Neubearbeitungsserver zuzuweisen.

Datenspeicherung

Der Cerity NDS *Datenbankserver* speichert Methoden und aufgenommene Daten. Nach Abschluss der Analyse werden die Ergebnisse in der Datenbank gespeichert. Mit den Cerity NDS Abfragewerkzeugen können Sie die Daten zur Überprüfung abrufen.

Die Größe des Datenspeicherbereichs hängt von folgenden Faktoren ab:

- Anzahl gleichzeitig arbeitender Benutzer
- Anzahl gleichzeitig betriebener Geräte
- Menge der in der Datenbank verfügbaren Online-Daten
- Anzahl analysierter Proben
- Anzahl der Nachbearbeitungszyklen (die mit jedem Zyklus erzeugten Revisions- und Audit-Informationen erhöhen das Datenvolumen).

Wie erleichtert Cerity NDS die Einhaltung geltender Bestimmungen?

Weitere Informationen zum Thema Compliance finden Sie im Technischen Referenzhandbuch.

Dieser Abschnitt bietet einen Überblick darüber, wie Cerity Networked Data System für pharmazeutische QA/QCdie Einhaltung der Bestimmungen für pharmazeutische QA/QC-Laboratorien (“Compliance”) unterstützt.

Zugriffsberechtigung

Cerity NDS benutzt die Sicherheitsmechanismen des Betriebssystems Windows und die Cerity NDS Rollen und Rollenrechte, um den Benutzerzugriff für folgende Cerity NDS Anwendungen und Systemkomponenten einzuschränken:

- Cerity Software Administration (Softwareverwaltung)
- Cerity for Pharmaceutical QA/QC (für die pharmazeutische QA/QC)
- Cerity Compliance (Einhaltung geltender Bestimmungen)
- Cerity Archive and Restore (Archivieren und Wiederherstellen)
- Cerity Reports and Report Template Editor (Reports und Reportvorlageneditor).

Berechtigungsprüfungen

Cerity NDS für die pharmazeutische QA/QC entspricht hinsichtlich der Zugangsberechtigung zu Anwenderaufgaben den Bestimmungen der FDA Ruling 21 CFR Part 11. Berechtigungsprüfungen auf Basis von Aufgaben und Aufgabenrechten stellen sicher, dass nur berechtigte Benutzer das System benutzen können. Der Cerity NDS Administrator wählt die Aufgaben für die Benutzer nach deren Rollen und zugeordneten Rechten aus.

Vertrauenswürdige und zuverlässige Daten

Das Cerity NDS sichert die Vertrauenswürdigkeit und Zuverlässigkeit der Daten auf folgende Weise:

- Betriebsqualifizierung und Leistungsvalidierung der Hardware und laborspezifischen Anwendungen von Cerity für die pharmazeutische QA/QC
- Sicherstellung der korrekten Speicherung und Wiederherstellung von Rohdaten, Zwischenwerten (Feldern und Parametern) und Ergebnissen durch das System
- Vermeidung von Datenbeschädigung durch Prüfung der Datenkonsistenz
- Überwachung der Integrität gemeinsam genutzter Daten und der manuellen Dateneingabe durch Prüfungen der Systemgeräte.

Programm zur Prüfung der Vorschriftsmäßigkeit

Das Programm zur Prüfung der Einhaltung geltender Vorschriften umfasst sowohl die Installationsqualifizierung als auch die Betriebsqualifizierung/Leistungsbestätigung für die unterstützte Hardware und Software.

Die Programme für IQ und OQ/PV sind sowohl als lizenziertes Produkt als auch als Service von Agilent Technologies erhältlich. Zu den angebotenen Validierungsdiensten und -produkten für Cerity NDS gehören die Agilent LC der Serie 1100, Agilent GC der Serie 6890, Agilent ADC der Serie 35900E sowie die Softwaresystemqualifizierung.

Durchgeführt werden diese IQ- und OQ/PV-Tests von Agilent Technologies Certified Service Professionals (ATCSP), Serviceingenieuren und Channelpartnern, ebenso wie von unabhängigen Beratern und Servicegruppen vor Ort.

Benutzerauthentifizierung

Das Cerity NDS für pharmazeutische QA/QC sorgt dafür, dass Benutzer ihre Änderungen an Daten verantworten müssen:

- Die elektronische Unterschrift ist nachvollziehbar mit den entsprechenden Datensätzen verbunden, damit ein Datensatz nicht durch Löschen, Kopieren oder Übertragen verfälscht werden kann.
- Mit Cerity NDS erfolgte elektronische Unterschriften werden authentifiziert und mit einem Zeitstempel versehen.
- Cerity NDS verlangt von Benutzern bei jeder Anmeldung in die Anwendung für die pharmazeutische QA/QC die Eingabe des Benutzernamens und Passworts.

Datenrückverfolgbarkeit

FDA 21 CFR Part 11.10e verlangt einen Audittrail für “Aktionen, die eine elektronische Aufzeichnung erstellen, ändern oder löschen.” Der Audittrail von Cerity Networked Data System bietet:

- einen Nachweis dafür, wer was wann mit dem Datensatz gemacht hat
- eine Aufzeichnung aller an den Daten erfolgten Änderungen ohne Überschreiben der Originaldaten
- strikte Versionskontrolle mit automatischer Sicherung der vorherigen Versionen der Daten in der Datenspeicherung.

1 Übersicht über Ihr Cerity NDS für pharmazeutische QA/QC

Wie erleichtert Cerity NDS die Einhaltung geltender Bestimmungen?

2
Grundlagen von Cerity für pharmazeutische QA/QC

Die vier Ansichten - wo die meisten Arbeitsschritte erfolgen 22
Wichtige Arbeitswerkzeuge 26
Online Help (Online-Hilfe) 29
Probenanalyse 31
Datenbanksuche 37
Methodenbearbeitung 39
Speicherungen in der Datenbank 40
Method Setup (Methodenerstellung) 44

Dieses Kapitel führt Sie in die wesentlichen Merkmale und Konzepte der Anwendung Cerity NDS für die pharmazeutische QA/QC ein. Sie finden hier Hintergrundinformationen zum gesamten Arbeitsablauf einer Probe, von der Probeneingabe bis hin zum Report. In den Kapiteln 4 und 5 erfahren Sie mehr über die Konzepte zur Methodenerstellung und Probenanalyse. Mit Hilfe dieses Kapitels können Sie auch die Übungen auf den Karten *Übungen für Anwender* absolvieren.

Die vier Ansichten - wo die meisten Arbeitsschritte erfolgen

Cerity NDS speichert “Daten” in einer Datenbank. Diese ”Daten” bestehen aus Rohdaten und berechneten Ergebnissen mit allen erforderlichen Metadaten wie Parameter, Felder, Formeln und Konfigurationen für vier primäre ”Objekte” in der Datenbank - eingetragene Proben und Sequenzen, Geräte, Proben- und Sequenzergebnisse sowie Methoden.

Sample View (Probenansicht)

Die Probenansicht bietet einen Arbeitsbereich für die Eingabe der Proben und das Einrichten von Sequenzen. Sie öffnen die Probenansicht mit der Option **Sample** in der Auswahlliste für die aktuelle Ansicht.

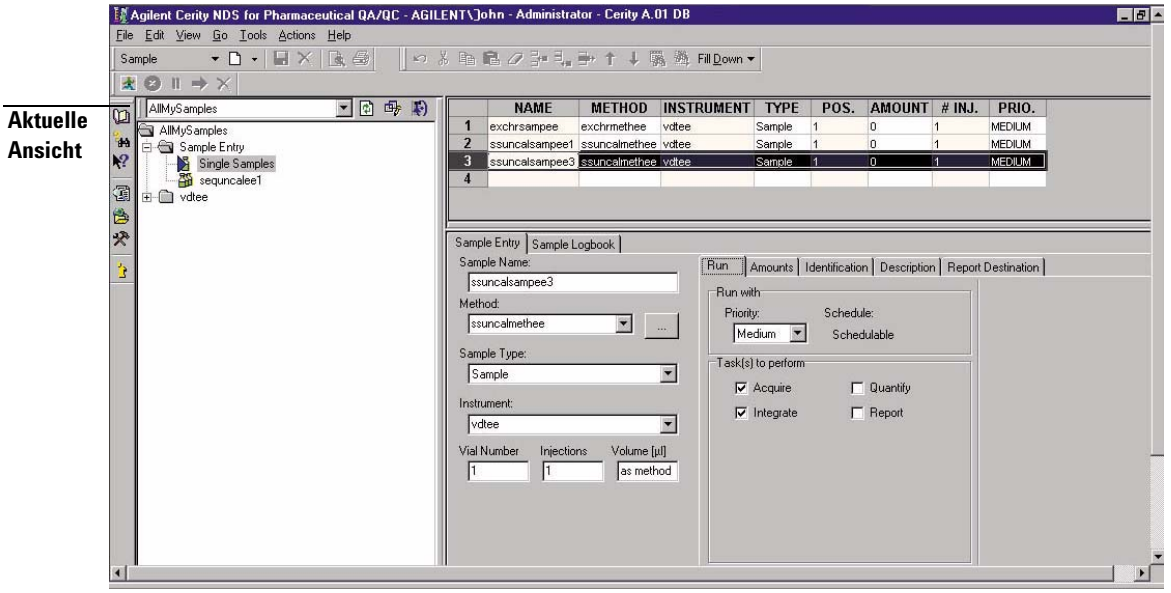


Abb. 6 Sample View

Instrument View (Geräteansicht)

Die Geräteansicht bietet einen Arbeitsbereich zur Anzeige des Gerätestatus. In der Geräteansicht können Sie Proben und Sequenzen starten und deren Bearbeitungsstatus verfolgen. Sie öffnen die Geräteansicht mit der Option **Instrument** in der Auswahlliste für die aktuelle Ansicht.

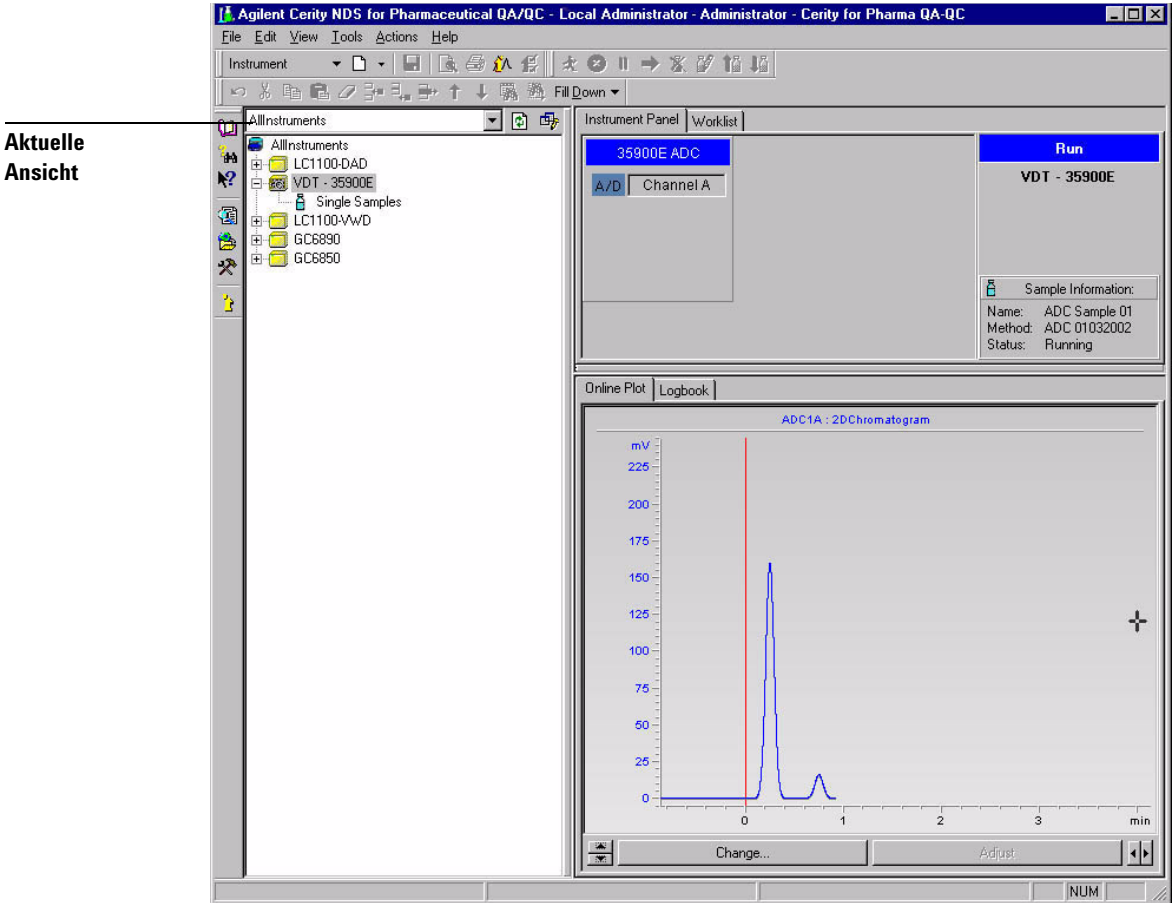


Abb. 7 Instrument View (Geräteansicht)

Result View (Ergebnisansicht)

Die Ergebnisansicht bietet einen Arbeitsbereich für das Überprüfen und Neubearbeiten von Proben und Sequenzen. Sie öffnen die Ergebnisansicht mit der Option **Result** in der Auswahlliste für die aktuelle Ansicht.

Aktuelle Ansicht

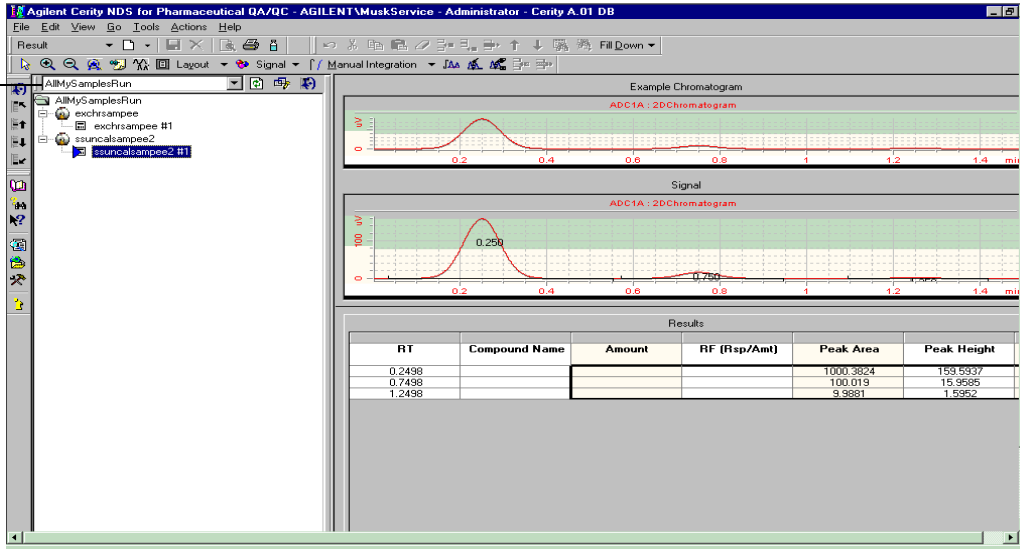


Abb. 8 Result View (Ergebnisansicht)

Method View (Methodenansicht)

Die Methodenansicht bietet einen Arbeitsbereich für das Einrichten von Methoden und Reports. Sie öffnen die Methodenansicht mit der Option **Method** in der Auswahlliste für die aktuelle Ansicht.

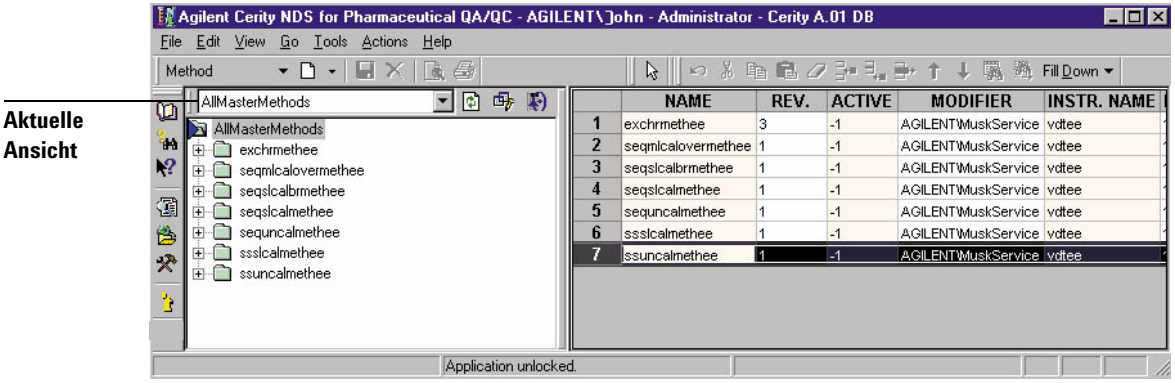


Abb. 9 Method View (Methodenansicht)

Wichtige Arbeitswerkzeuge

Ihre wichtigsten Arbeitswerkzeuge finden Sie in der Menüleiste und den Symbolleisten für die aktuelle Ansicht. Zugriff auf weitere Werkzeuge erhalten Sie durch einen Rechtsklick auf eine Tabelle oder Grafik.

Standard-Symbolleiste – Werkzeuge für die Aktuelle Ansicht und die Schaltfläche "New".

Die Schaltfläche "New" – Für das Erstellen einer Methodenvorlage, Sequenz oder Abfrage.

Auswahl der aktuellen Ansicht – Wählen Sie hier eine der vier Ansichten aus.

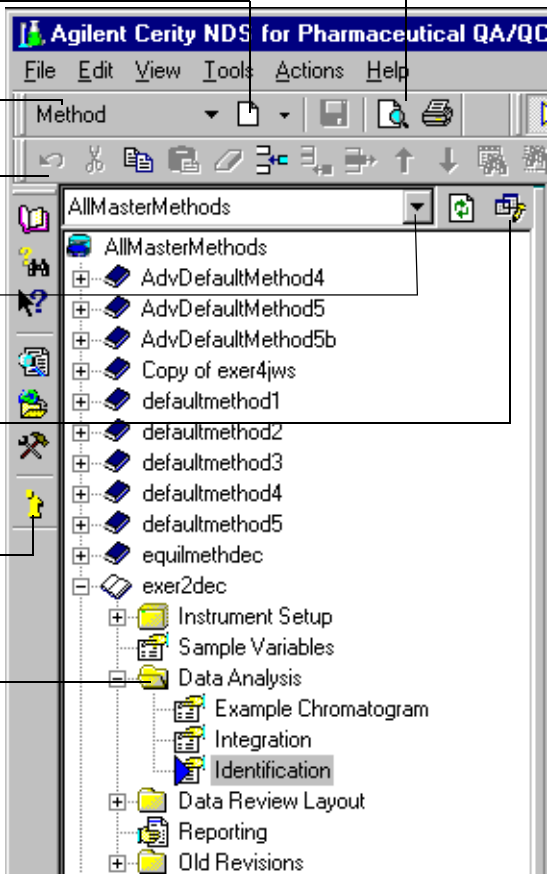
Symbolleiste Bearbeiten – Die Werkzeuge dieser Symbolleiste sind ausgeblendet, wenn sie für den aktuellen Arbeitsbereich nicht einsetzbar sind.

Abfrageliste – Wählen Sie Proben, Geräte, Methoden oder Ergebnisse aus der Datenbank zur Anzeige in der Strukturansicht aus.

Schaltfläche Abfrageassistent – Definieren Sie eine neue Abfrage von Proben, Geräten, Methoden oder Ergebnissen aus der Datenbank.

Symbolleiste Hilfe – Hier finden Sie die benötigte Hilfe.

Strukturansicht – Erweitern Sie einen Ordner oder wählen Sie ein Element aus der Strukturansicht aus, um die Daten im Arbeitsbereich bearbeiten zu können.

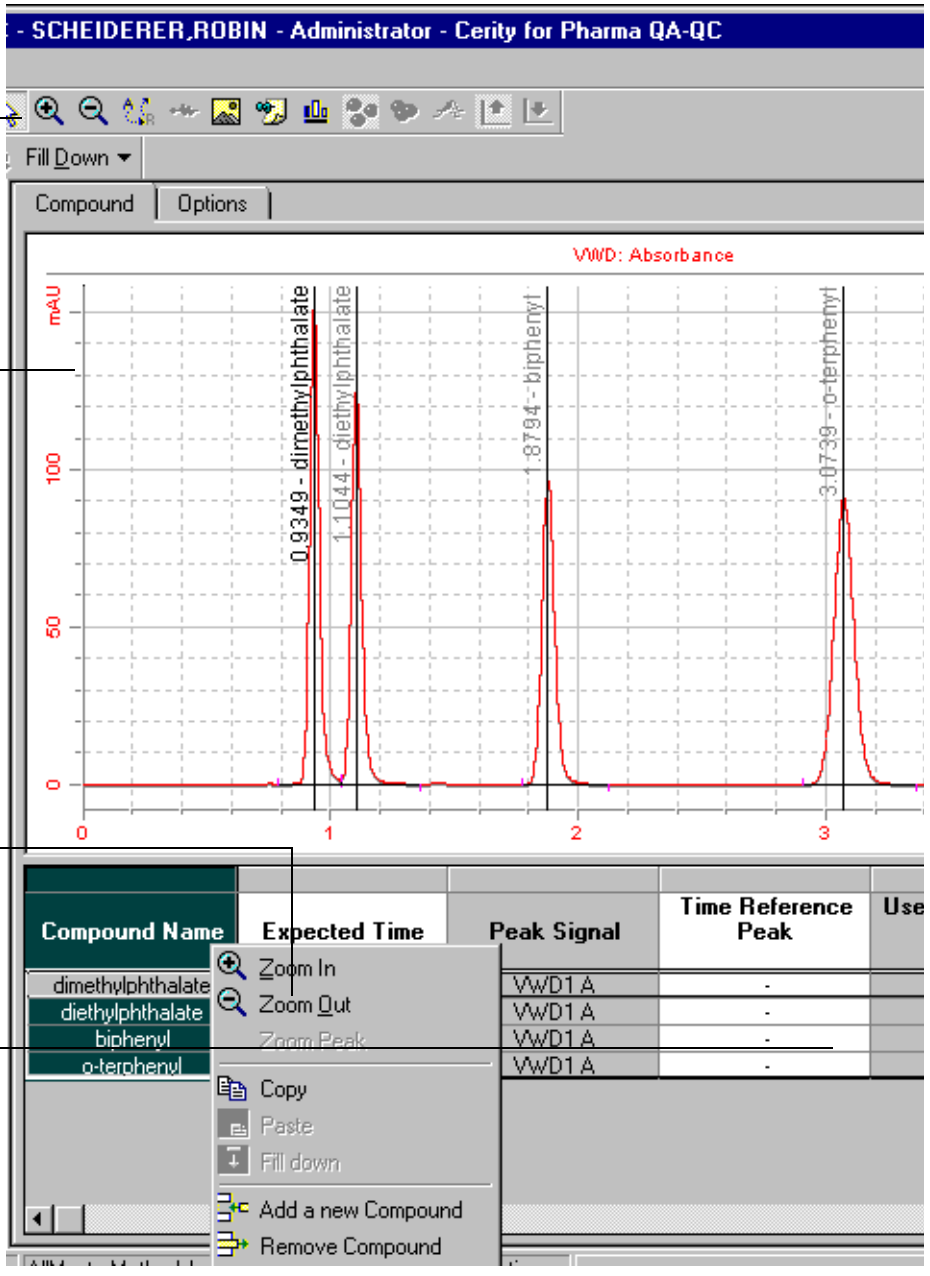


Werkzeuge oder Aktionssymbolleiste – zum Ändern einer Tabelle oder Durchführen einer Aufgabe im Arbeits-bereich aus.

Arbeitsbereich – Verwenden Sie die Symbolleisten und Befehle zur Anzeige und Änderung von Tabellen, Grafiken, Dialogfeldern oder Listen.

Kontextmenü – Beim Rechtsklick auf die Zelle einer Tabelle erscheint ein Menü mit Kurz-befehlen zur Bearbeitung der Tabelle

Dropdown-Liste – Wählen Sie eine Zelle in der Tabelle aus, um auf die Liste zuzugreifen.



Online Help (Online-Hilfe)

Für jede Ansicht finden Sie Online-Hilfe in den folgenden Bereichen:

- Symbolleiste Hilfe
- Hilfemenü
- QuickInfo

Symbolleiste Hilfe

Es folgt nun eine Beschreibung der Symbole in der Symbolleiste Hilfe:

Contents (Inhalt) – Diese Schaltfläche bringt Sie zum Online-Hilfe-system. Mit dem Inhaltsverzeichnis, Index, Glossar und Suchen-Werkzeug können Sie die Aufgabenbeschreibung und Hilfe für aktuelle Ansichten, Dialogfelder oder Assistenten finden.

Search (Suchen) – Das Suchen-Werkzeug hilft beim Auffinden des gewünschten Themas.

What's This? - Wenn der Zeiger zu einem Fragezeichen wird, können Sie innerhalb einer Ansicht, eines Dialogfeldes oder Assistenten klicken, um Hilfe zu dieser Benutzeroberfläche zu erhalten. Diese Hilfe heißt "User Interface Help" in der Inhaltsauswahl.

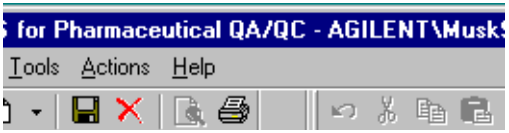
Online Books (Online-Bücher) – Sie können die Cerity-Dokumentation als Datei im PDF-Format aufrufen.

Other Resources (Andere Ressourcen) – Diese Schaltfläche verbindet Sie mit der Website von Agilent, wo Sie Zubehör und technischen Support finden.

SOPs – Wenn von Ihrem Systemadministrator eingerichtet, führt diese Schaltfläche zu Ihren Labor-SOPs oder einer anderen Adresse in Ihrem Intranet.

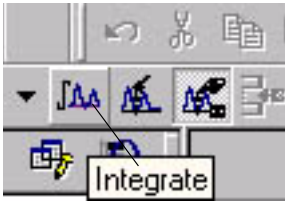
Help Menu (Hilfemenü)

Sie erreichen die Hilfe über die Symbolleiste Hilfe im Menü Hilfe.



QuickInfos in der Symbolleiste

Führen Sie den Mauszeiger über die Schaltflächen in der Symbolleiste, um die Namen der Schaltflächen anzuzeigen.



Probenanalyse

Weitere Informationen zum besseren Verständnis der Probenanalyse finden Sie in Kapitel 3, "Probenanalyse".

In den Ansichten Proben, Geräte und Ergebnisse in Cerity für pharmazeutische QA/QC können Sie Proben eintragen, Sequenzen erstellen, einzelne Proben oder Sequenzen starten und Ergebnisse überprüfen und neu berechnen.

Einzelner Probeneintrag

Sie können in der Probenansicht jeweils eine Probe eintragen. Arbeiten Sie mit Einzelproben, wenn Ihre Analyse keine sequenzspezifischen Neukalibrierungen oder Gruppenberechnungen erfordert.

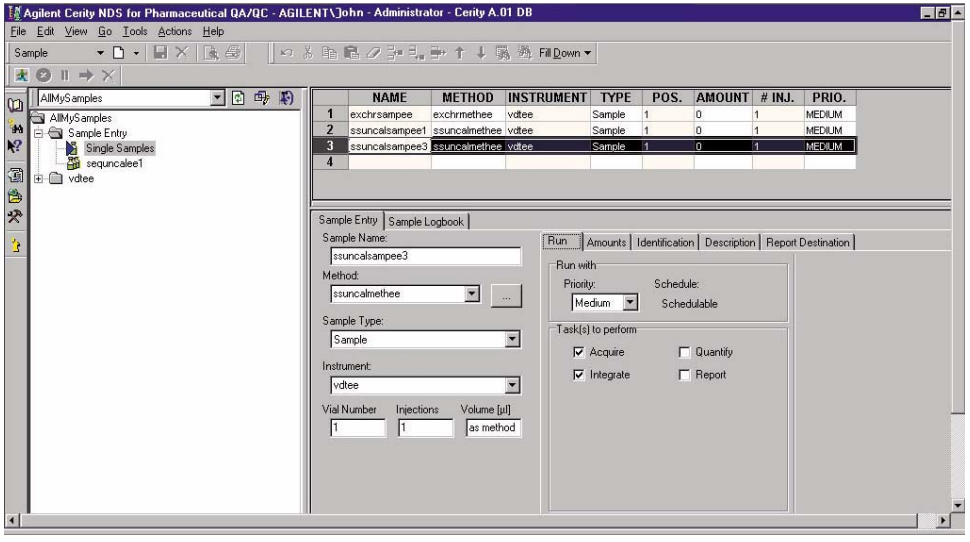


Abb. 10 Probeneintrag für eine Einzelprobe

Sequenz einrichten

Erstellen Sie zunächst eine neue Sequenz und ordnen Sie dann die Sequenz einem Gerät und einer Methode zu. Nachdem Sie eine neue Sequenz erstellt haben, erscheint sie in der Probenansicht.

Weitere Details zu Sequenzvorlagen in der Methode finden Sie in Kapitel 4, "Methodenerstellung".

Es erscheint auch die Sequenzvorlage, die in der für die Sequenz verwendeten Methode erstellt wurde. In der Sequenzvorlage können Sie Probennamen, LIMS IDs, Mengen, Gewichte oder Konzentrationen ändern.

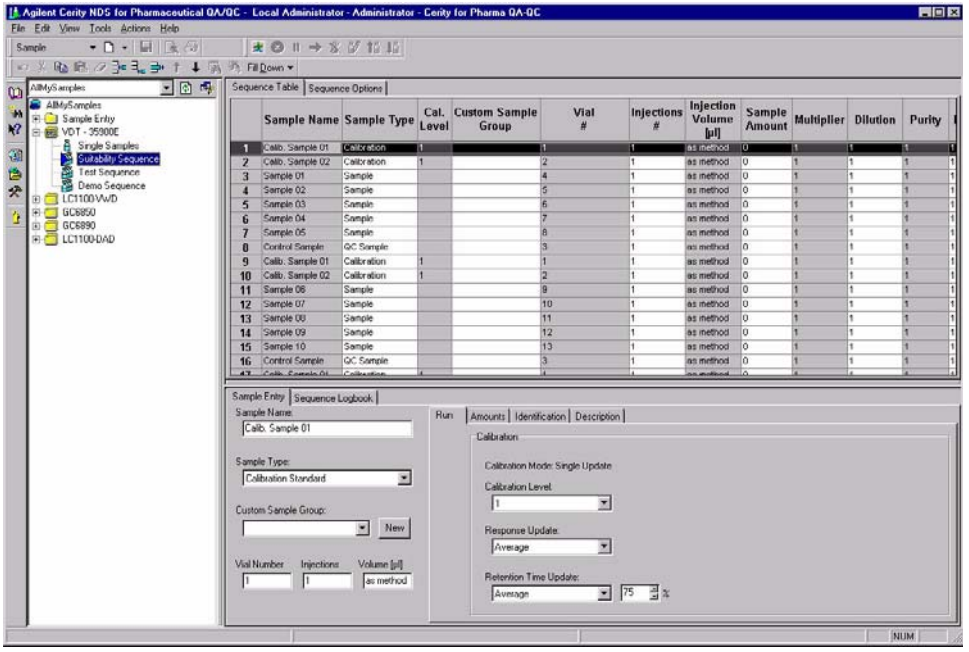


Abb. 11 Die Sequenztabelle in der Probenansicht

Gerätevorbereitung

In der Geräteansicht können Sie den Gerätestatus (z.B. Status, Druck oder Temperatur) überwachen, Diagnostikreports abrufen und das Gerät equilibrieren, beispielsweise die Pumpe spülen oder die UV/VIS-Lampe des Detektors einschalten.

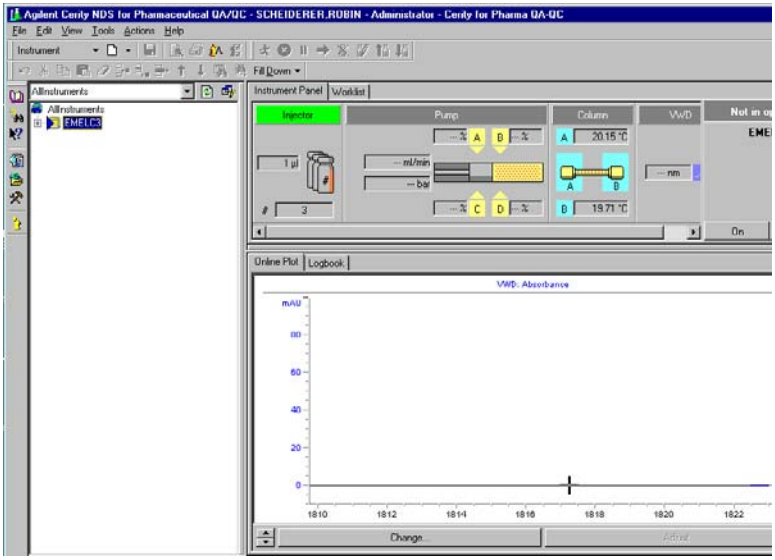


Abb. 12 Geräteansicht

Proben oder Sequenzen starten

Sie können Proben oder Sequenzen entweder in der Probenansicht oder in der Geräteansicht starten. Wenn Sie auf die Schaltfläche **Run** klicken, übergibt das System den Analysenauftrag an den Terminplaner von Cerity für die pharmazeutische QA/QC.

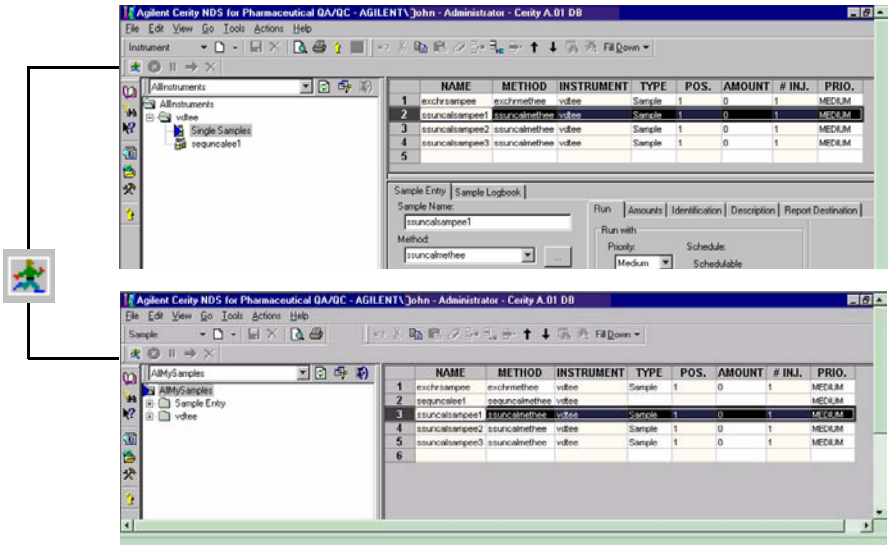

Agilent Cerity NDS for Pharmaceutical QA/QC - AGILENT\John - Administrator - Cerity A.01 DB
File Edit View Go Tools Actions Help
Instrument
Fill Down
AllInstruments
vdtee
Single Samples
sequncalee1
NAME METHOD INSTRUMENT TYPE POS. AMOUNT # INJ. PRIO.
1 exchrsampee exchrmethee vdtee Sample 1 0 1 MEDIUM
2 ssuncalsampee1 ssuncalmethee vdtee Sample 1 0 1 MEDIUM
3 ssuncalsampee2 ssuncalmethee vdtee Sample 1 0 1 MEDIUM
4 ssuncalsampee3 ssuncalmethee vdtee Sample 1 0 1 MEDIUM
5
Sample Entry Sample Logbook
Sample Name:
ssuncalsampee1
Method:
ssuncalmethee
Run Amounts Identification Description Report Destination
Run with:
Priority:
Medium
Schedule:
Schedulable
Agilent Cerity NDS for Pharmaceutical QA/QC - AGILENT\John - Administrator - Cerity A.01 DB
File Edit View Go Tools Actions Help
Sample
Fill Down
AllMySamples
Sample Entry
vdtee
NAME METHOD INSTRUMENT TYPE POS. AMOUNT # INJ. PRIO.
1 exchrsampee exchrmethee vdtee Sample 1 0 1 MEDIUM
2 sequncalee1 sequncalmethee vdtee MEDIUM
3 ssuncalsampee1 ssuncalmethee vdtee Sample 1 0 1 MEDIUM
4 ssuncalsampee2 ssuncalmethee vdtee Sample 1 0 1 MEDIUM
5 ssuncalsampee3 ssuncalmethee vdtee Sample 1 0 1 MEDIUM
6

Abb. 13 Symbolleiste Analysenstart

Status von Proben und Sequenzen

Nach dem Start der Analyse werden die Analysenläufe der Einzelprobe und der Sequenzen sowohl aus der Geräte- als auch aus der Probenansicht entfernt. Die Analysenläufe erscheinen nun in der Arbeitsliste; beendete Injektionen erscheinen in der Ergebnisansicht.

In der **Worklist** (Arbeitsliste) der Geräteansicht können Sie den Status einzelner Proben, einer Gruppe von Einzelproben, einer Sequenz und einer Reihe von Sequenzen sehen.

Sie können auch eine Sequenz, eine Serie von Sequenzen und eine Gruppe von Proben in der Arbeitsliste beenden, pausieren oder weiterlaufen lassen.

Wenn Sie eine Sequenz pausieren lassen, beendet das System den Lauf der aktuellen Probe, bevor Sie mit dem Lauf der nächsten Probe in der Sequenz fortfahren können.

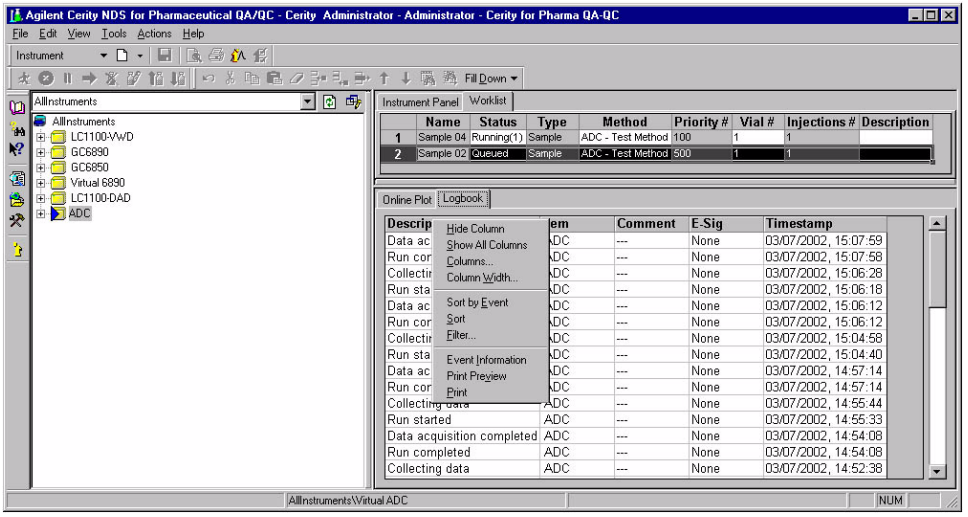


Abb. 14 Proben- oder Sequenzarbeitsliste

Ergebnisansicht

Wählen Sie die Ergebnisse, die Sie überprüfen wollen, in der Strukturansicht der Ergebnisansicht (**Result**) aus. Dazu müssen Sie wissen, wie die Ergebnisse in der Strukturansicht organisiert sind. Wenn Sie die Ergebnisse nicht sehen, müssen Sie eventuell ein Suchergebnis (Query) aus der Liste oberhalb der Strukturansicht nehmen oder eine Datenbankabfrage durchführen.

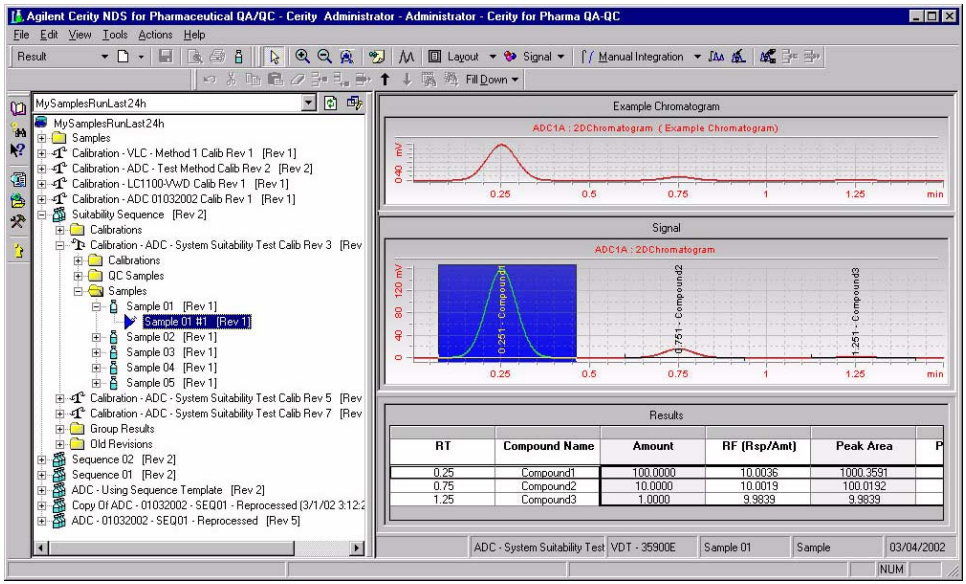

Agilent Cerity NDS for Pharmaceutical QA/QC - Cerity Administrator - Administrator - Cerity for Pharma QA-QC
File Edit View Tools Actions Help
Result
Layout
Signal
Manual Integration
Fill Down
MySamplesRunLast24h
Samples
Calibration - VLC - Method 1 Calib Rev 1 [Rev 1]
Calibration - ADC - Test Method Calib Rev 2 [Rev 2]
Calibration - LC1100-WD Calib Rev 1 [Rev 1]
Calibration - ADC 01032002 Calib Rev 1 [Rev 1]
Suitability Sequence [Rev 2]
Calibrations
Calibration - ADC - System Suitability Test Calib Rev 3 [Rev
Calibrations
QC Samples
Samples
Sample 01 [Rev 1]
Sample 01 #1 [Rev 1]
Sample 02 [Rev 1]
Sample 03 [Rev 1]
Sample 04 [Rev 1]
Sample 05 [Rev 1]
Calibration - ADC - System Suitability Test Calib Rev 5 [Rev
Calibration - ADC - System Suitability Test Calib Rev 7 [Rev
Group Results
Old Revisions
Sequence 02 [Rev 2]
Sequence 01 [Rev 2]
ADC - Using Sequence Template [Rev 2]
Copy Of ADC - 01032002 - SEQ01 - Reprocessed [3/1/02 3:12:2
ADC - 01032002 - SEQ01 - Reprocessed [Rev 5]
Example Chromatogram
ADC1A : 2DChromatogram (Example Chromatogram)
Signal
ADC1A : 2DChromatogram
0.251 - Compound1
0.751 - Compound2
1.251 - Compound3
min
Results
RT
Compound Name
Amount
RF (Rsp/Amt)
Peak Area
0.25 Compound1 100.0000 10.0036 1000.3591
0.75 Compound2 10.0000 10.0019 100.0192
1.25 Compound3 1.0000 9.9839 9.9839
ADC - System Suitability Test
VDT - 35900E
Sample 01
Sample
03/04/2002
NUM

Abb. 15 Ergebnisansicht

In der **Ergebnisansicht** können Sie auch Änderungen an den Ergebnissen sowie eine Überarbeitung vornehmen. Oder Sie können nach Änderung der Methode eine Überarbeitung mit der aktuellsten Version der Methode durchführen. Sie können auch die Ergebnisse mit einer anderen Methode auswerten.

In der **Ergebnisansicht** können Sie, in Abhängigkeit von der Berechtigungsebene, die Ihnen der Administrator erteilt hat, auch Ergebnisse annehmen oder zurückweisen.

Datenbanksuche

Um Ergebnisse zu überprüfen oder nachzuarbeiten, müssen Sie zunächst das Ergebnis finden, das von Interesse ist.

Ergebnisabfrage

Um Ergebnisse aus der Datenbank einsehen zu können, müssen Sie das System abfragen. Das Cerity NDS wird mit Standardabfragen als Hilfe für einen schnellen Start ausgeliefert.

- Wählen Sie eine Abfrage aus der **Query List** (Abfrageliste) oberhalb der Strukturansicht aus und sehen Sie sich die vom **Query Wizard** (Abfrageassistenten) bereits erstellten Ergebnisse an.
- Falls Sie ein erfahrener Anwender sind, können Sie auch eigene Abfragen mit dem **Abfrageassistenten** erstellen. Definieren Sie dazu die Kriterien, nach denen in der Datenbank die Ergebnisse durchsucht werden sollen.

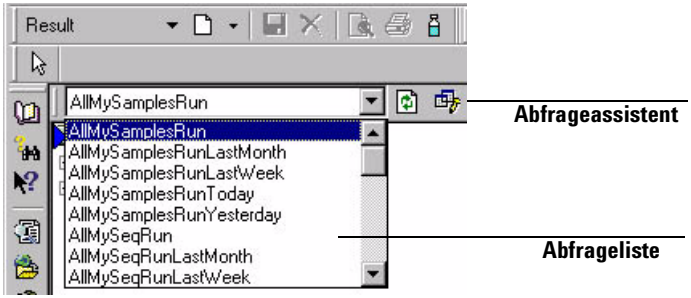


Abb. 16 Abfrageliste und Abfrageassistent

Methodenabfrage

Sie können mittels Abfragen auch Methoden suchen, die Sie ändern möchten.

Andere Abfragen

Sie können auch nach einem definierten Satz noch nicht durchlaufener Proben oder Sequenzen oder konfigurierten Geräten suchen, aber dies geschieht sicherlich seltener.

Abfrageassistent

Der **Query Wizard** (Abfrageassistent) hilft Ihnen bei der Suche nach benötigten Informationen. Das Cerity NDS bietet einen Abfrageassistenten für jede Ansicht.

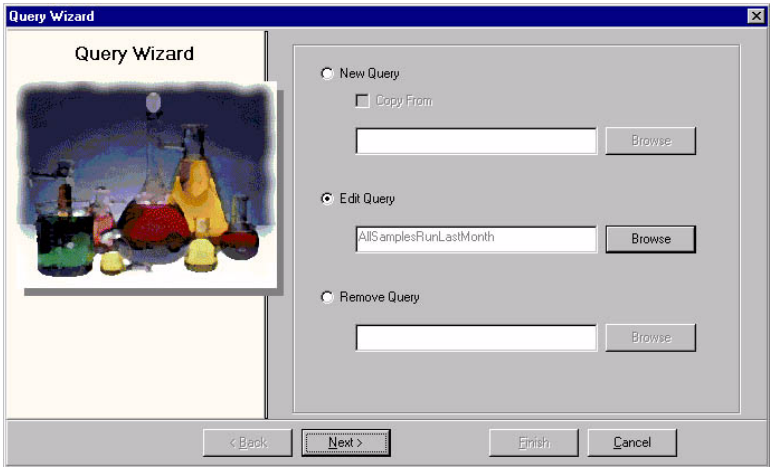


Abb. 17 Abfrageassistent

Methodenbearbeitung

Sobald Methoden nach Ihren SOPs oder Monographien erstellt sind, können in der Methodenansicht leicht Änderungen vorgenommen werden.

In der Methodenansicht sind folgende Änderungen der Methode möglich:

- Änderung der Geräteparameter
- Änderung der Probenvariablen
- Änderung einer Sequenzvorlage (dies sollten nur erfahrene Benutzer tun)
- Änderung der Parameter der Datenanalyse
- Änderung des Layouts zur Darstellung der Ergebnisse
- Auswählen eines anderen Reporttyps für den Report.

Sie können in der Methodenansicht auch eine bestehende Methode ändern.

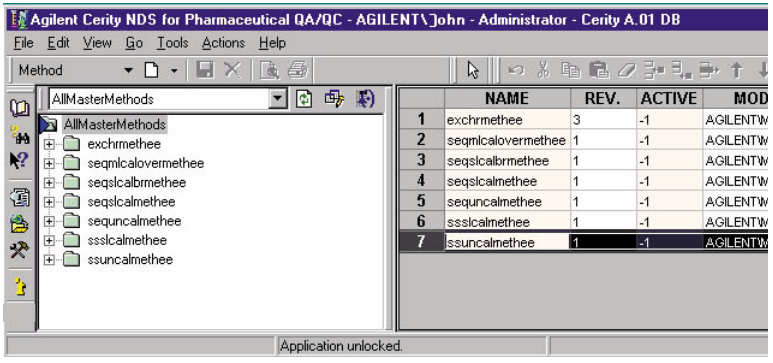


Abb. 18 Methodenansicht

Speicherungen in der Datenbank

Der Cerity NDS Administrator kann das Protokollverhalten für bestimmte Aufgaben von Cerity für die pharmazeutische QA/QC festlegen. Cerity NDS bietet ein Formular für die Auditkommentare und speichert eine Protokolldatei mit Auditeinträgen, wenn Sie Änderungen in der Datenbank speichern.

Auditeinträge

Wenn Sie Änderungen an einer Methode, einer eingegebenen Probe oder Sequenz oder an einem Ergebnis gespeichert haben, oder von einer Methode oder Probe zur nächsten wechseln, erscheint das Dialogfeld **Save Changes to the Database** (Änderungen in der Datenbank speichern). Dies ist das Formular, das Cerity NDS zur Eingabe des Auditkommentars anbietet.

Sie müssen unter Umständen die Liste der Änderungen durchsehen und einen Grund für die Änderung angeben. Zur Aufzeichnung der Änderung kann eine elektronische Unterschrift mit Benutzername und Passwort erforderlich sein.

Im Cerity NDS kann der Systemadministrator festlegen, welche Aufgaben im System zwingend einen Auditkommentar und eine elektronische Unterschrift erfordern.

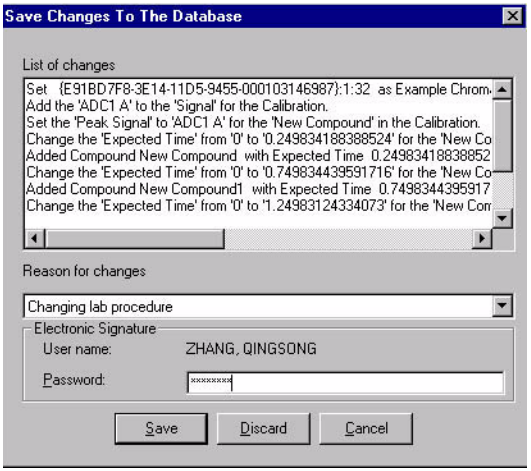

Save Changes To The Database
List of changes
Set {E91BD7F8-3E14-11D5-9455-000103146987}:1:32 as Example Chrom
Add the 'ADC1 A' to the 'Signal' for the Calibration.
Set the 'Peak Signal' to 'ADC1 A' for the 'New Compound' in the Calibration.
Change the 'Expected Time' from '0' to '0.249834188388524' for the 'New Co
Added Compound New Compound with Expected Time 0.24983418838852
Change the 'Expected Time' from '0' to '0.749834439591716' for the 'New Co
Added Compound New Compound1 with Expected Time 0.7498344395917
Change the 'Expected Time' from '0' to '1.24983124334073' for the 'New Com
Reason for changes
Changing lab procedure
Electronic Signature
User name:
ZHANG, QINGSONG
Password:
Save
Discard
Cancel

Abb. 19 Dialogfeld Save Changes To The Database

Audit-Logbücher

Das Cerity NDS führt eine permanente Versionskontrolle sowie benutzerunabhängige Audittrails bei den verwalteten Datenbeständen durch. Alle Audittrails erscheinen in den Logbüchern der jeweiligen Ansichten.

Methoden

Das **Method Logbook** (Methodenlogbuch) erscheint im Arbeitsbereich Description für Methoden, wenn Sie in der Methodenansicht eine Methode aus der Strukturansicht auswählen.

Einzelproben

Den Audittrail für eingetragene, aber noch nicht analysierte Proben finden Sie im **Sample Logbook** (Probenlogbuch). Das **Sample Logbook** erscheint im Arbeitsbereich Single Samples in der Proben- oder Geräteansicht.

Klicken Sie, nachdem die Einzelproben gelaufen sind, auf die Schaltfläche **Sample Details** in der Symbolleiste, um das Logbuch für jede Probe in der Ergebnisansicht anzuzeigen.

Sequenzen

Den Audittrail für eingetragene, aber noch nicht analysierte Sequenzen finden Sie im **Sequence Logbook** (Sequenzlogbuch) der Proben- oder Geräteansicht.

Sobald eine Sequenz analysiert wurde, finden Sie das **Sequence Logbook** in der Ergebnisansicht, wenn Sie die Sequenz in der Strukturansicht auswählen.

Proben- oder Sequenzläufe

Sie können die Auditaufzeichnungen für eine Probe oder Sequenz im Arbeitsbereich Geräte der Geräteansicht einsehen.

Die Spalten des Logbuches, die nicht selbsterklärend sind, werden in der Tabelle 1 und in Abb. 20 beispielhaft erklärt.

Tabelle 1 Beispiel eines Logbuches

Spalte	Inhalt (Beispiel)	Funktion
E-Sig	Signed None	Kennzeichnet Aktionen, für die eine elektronische Unterschrift (E-Sig) konfiguriert ist und in Cerity NDS Software Administration verwendet wird.
Source	cerity_test\sspencer Automation UserStamp	Wenn **E-sig** konfiguriert ist, wird der Benutzername für die Unterschrift angezeigt. Wenn **E-Sig** nicht konfiguriert ist, wird entweder die Benutzerkennung für die Aktion oder, im Falle einer automatischen Aktion, Automation angezeigt.
Type	Audit Information	Zeigt an, ob die Einzelheiten für ein Audit oder zur allgemeinen Information vorgesehen sind.
Comment	Changing lab procedure Method released	Zeigt den Kommentar (Auditbegründung), der während der E-Sig Aktion einzugeben oder aus einer Auswahlliste gewählt worden ist.

Description	Item	Comment	E-Sig	Timestamp	Source	Type	Host
Change the 'To' from '1000' to '180' for the 35900SetPoints, Channel A.	35900SetPoints, Channel A	Updated	None	06/11/2002, 08:22:37	wadlc001\demo	Audit	WADLC001
Change the 'From' from '0' to '-20' for the 35900SetPoints, Channel A.	35900SetPoints, Channel A	Updated	None	06/11/2002, 08:22:37	wadlc001\demo	Audit	WADLC001
Change the 'External State (Remote Bus Mode)' from 'ACTIVE' to 'OFF' for the 35900SetPoints, Channel A.	35900SetPoints, Channel A	Updated	None	06/11/2002, 08:22:37	wadlc001\demo	Audit	WADLC001
Change the 'Stop Time (min)' from '1' to '1.4' for the 35900SetPoints, Channel A.	35900SetPoints, Channel A	Updated	None	06/11/2002, 08:22:37	wadlc001\demo	Audit	WADLC001
Method revised, new revision: 2	---	---	None	06/11/2002, 08:22:18	wadlc001\demo	Information	WADLC001
Created.	Method	Initial configuration	Signed	06/11/2002, 08:22:05	wadlc001\demo	Audit	WADLC001
Method created by operator: Demo User							

Abb. 20 Methodenlogbuch mit sämtlichen Spalten

Method Setup (Methodenerstellung)

Die Methode in Cerity für die pharmazeutische QA/QC stellt ein elektronisches Abbild Ihrer Analysenvorschrift, Monographie oder SOP dar. Daher werden Systemadministratoren oder Analytiker eine Methode normalerweise nur einmal bzw. nur selten erstellen.

Methoden werden in zwei Schritten erstellt. Zuerst erstellen Sie eine Methodenvorlage mit Hilfe des **Method Wizard** (Methodenassistenten). Die *Methodenvorlage* hat ein Format, das nur die Entragung der für die Analyse relevanten Parameter zulässt. Anschließend tragen Sie die Parameter in die Methodenvorlage ein, um eine *Methode* in der Methodenansicht zu erstellen.

Hilfestellungen für das Erstellen von Methoden finden Sie unter "Cerity für die pharmazeutische QA/QC - Methodenkonzepte" auf Seite 97.

Erstellen einer Methodenvorlage

Bevor Sie Geräteparameter eintragen oder eine Kalibriertabelle erstellen können, müssen Sie zunächst ein Rahmengerüst für die Analyse anlegen. Mit dem **Methodenassistenten** wählen Sie die zur Erstellung einer Methodenvorlage benötigten Optionen aus.

Einige der möglichen Optionen, die Ihnen im **Methodenassistenten** angeboten werden, sind:

- Auswahl eines Methodennamens für Einzelproben oder Sequenzen
- Zuordnung der Methode zu einem Gerät
- Auswahl der Optionen für die Datenanalyse
- Auswahl der Optionen für die Substanzidentifikation
- Auswahl der Optionen für die Kalibrierung
- Auswahl der Optionen für die Quantifizierung.

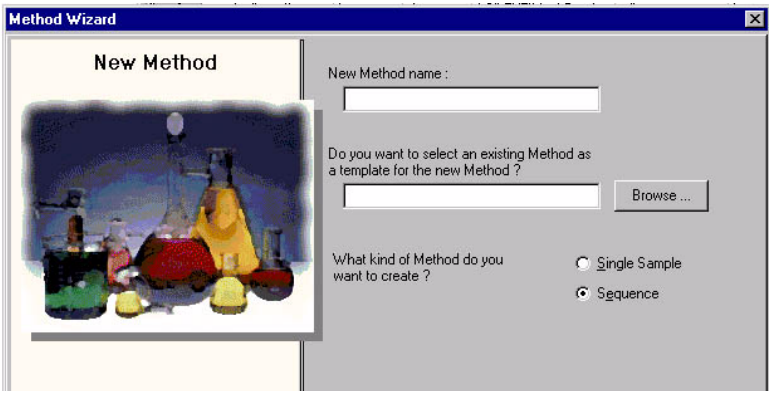

Method Wizard
New Method
New Method name :
Do you want to select an existing Method as a template for the new Method ?
Browse ...
What kind of Method do you want to create ?
Single Sample
Sequence

Abb. 21 Method Wizard (Methodenassistent)

Parametereingabe

Nachdem Sie eine neue Methodenvorlage erstellt haben, zeigt die Methodenansicht die neue Methode in der Strukturansicht an. Die anfänglichen Parameter geben Sie weiterhin in der Methodenansicht ein.

Reporterstellung

Das Cerity NDS kann Reports am Ende der Datenauswertung erstellen. Zuvor müssen Sie jedoch Reporttyp und Reportvorlagen in der Methode auswählen. Die Reportvorlage definiert die Daten für den Report und das Layout der Felder für die im Report darzustellenden Werte. Das Cerity NDS greift beim Erzeugen des Reports auf die in der Reportvorlage definierten Daten zu.

Auswahl des Reporttyps Cerity für pharmazeutische QA/QC beinhaltet einen Satz an Standard-Reporttypen. Wenn Sie beim Erstellen einer Methode in der Strukturansicht **Reporting** wählen, erscheinen im Arbeitsbereich die Standardreporttypen.

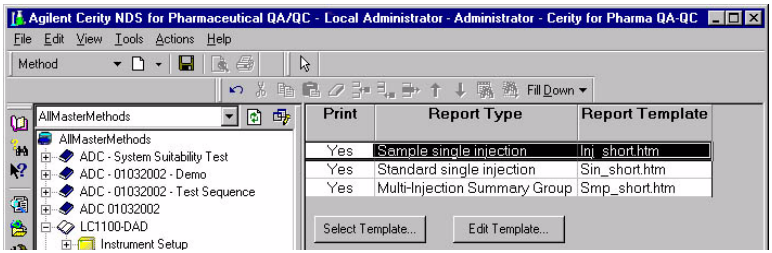


Abb. 22 Reporttypen in der Methodenansicht für Einzelproben

Sie haben auch in der Probenansicht die Möglichkeit, einen Reporttyp für bereits eingetragene Proben oder Probensequenzen zu drucken oder zu erstellen.

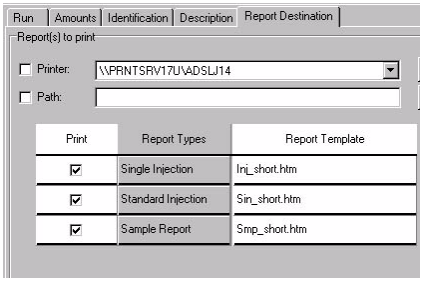


Abb. 23 Reporttypen in der Probenansicht

Auswahl der Reportvorlage Jeder Standardreporttyp verwendet eine Standardreportvorlage. Sie können den Reporttyp nicht ändern, aber Sie können für den Reporttyp eine andere Reportvorlage wählen. Dies können Sie im Arbeitsbereich Reporting machen.

Bearbeiten der Reportvorlage Die Systemadministratoren oder Benutzer mit entsprechender Berechtigung können ebenfalls mit dem “Report Template Editor” (Reportvorlageneditor) bestehende Reportvorlagen ändern oder neue erstellen. Dieser Report Template Editor ermöglicht das Erstellen einer neuen Reportvorlage bzw. das Ändern einer vorhandenen. Sie können zwischen vorgegebenen Abschnitten und über zweitausend Feldern wählen, um eine Reportvorlage entsprechend Ihrer Spezifikation zu erstellen.

Sie erreichen den *Cerity Report Template Editor* über den Arbeitsbereich Reporting, wenn Sie eine Methode erstellen.

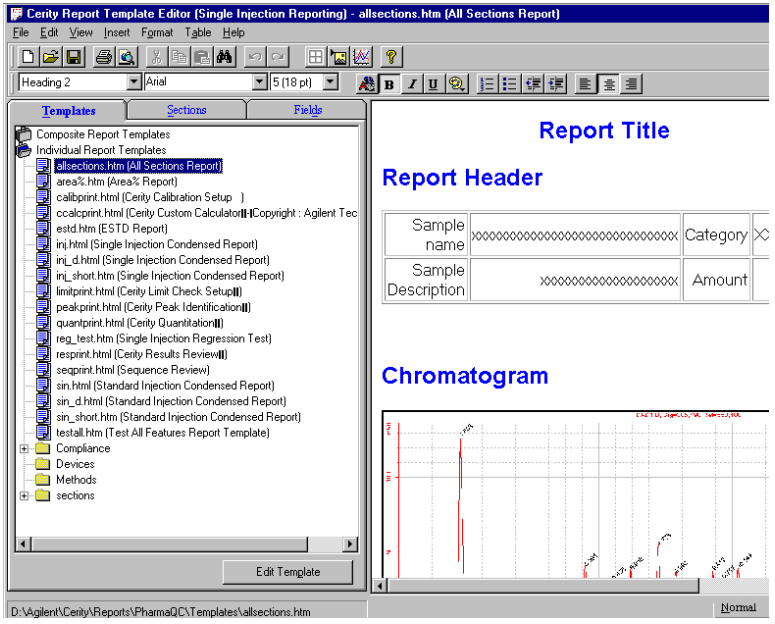


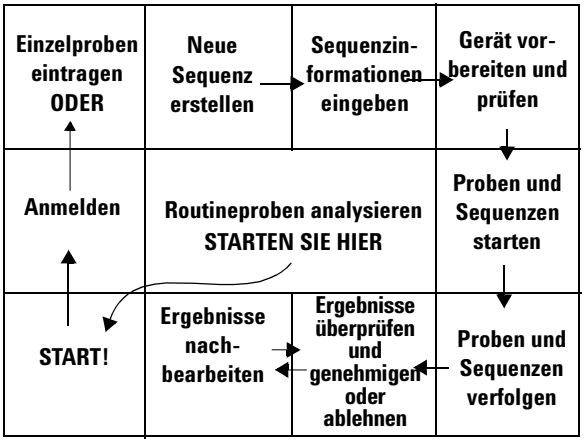
Abb. 24 Reportvorlageneditor

3
Probenanalyse

Eingabe von Probe und Sequenz 51
Vorbereitung auf den Analysenlauf 54
Planung und Verfolgung von Analysenläufen 55
Ergebnisüberprüfung 58
Annahme/Ablehnung von Ergebnissen 64
Neuauswertung von Kalibriermethoden 67
Versionen der Ergebnisse und Kalibriertabellen 73
Versionsführung und Nachvollziehbarkeit bei Sequenzen 78

Lernen Sie die Konzepte kennen, die Ihnen dabei helfen werden, die Probenanalyse in Cerity für die pharmazeutische QA/QC besser zu verstehen. Verwenden Sie dieses Kapitel zur Bewältigung der Übungen “Analyse von Routineproben” aus den Karten *Übungen für Anwender*.

Das folgende Schema veranschaulicht den Ablauf für Routineproben. Beginnen Sie bei **START.** Jeder Abschnitt entspricht einer Arbeitsfolge im Labor.



Jedes Thema in diesem Kapitel bietet Ihnen Hintergrundinformationen, mit denen Sie diesen Ablauf Schritt für Schritt nachvollziehen können.

Eingabe von Probe und Sequenz

Einzelprobeneintrag

In *Cerity für die pharmazeutische QA/QC enthält eine Einzelprobe oder Sequenz* alle benötigten Methoden-, Proben- und Sequenzinformationen, um die Daten aufzunehmen und zu verarbeiten. Diese Informationen werden allen Analysenläufen, Rohdaten und ausgewerteten Daten hinzugefügt; daraus resultiert das *Ergebnis* einer Einzelprobe oder einer Sequenz. in *Cerity für die pharmazeutische QA/QC*.

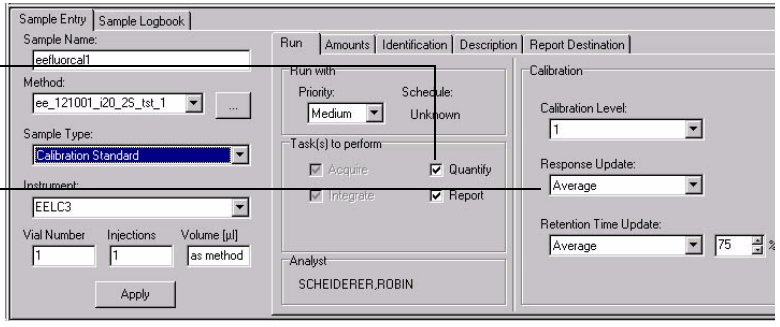
Sie können Einzelproben an einer von drei Stellen eintragen:

- Probenansicht – Arbeitsbereich Single Samples im Ordner Sample Entry
- Probenansicht – Arbeitsbereich Single Samples im Ordner Instrument
- Geräteansicht – Arbeitsbereich Single Samples im Ordner Instrument.

Im Fenster **Sample Entry** können an jeder Stelle dieselben Probeninformationen eingegeben werden. Damit das System die Informationen übernimmt, müssen Sie auf die Schaltfläche **Apply** klicken.

Run tasks to perform (auszuführende Aufgaben) – Sie müssen Quantify aktivieren, damit die Substanzen identifiziert werden.

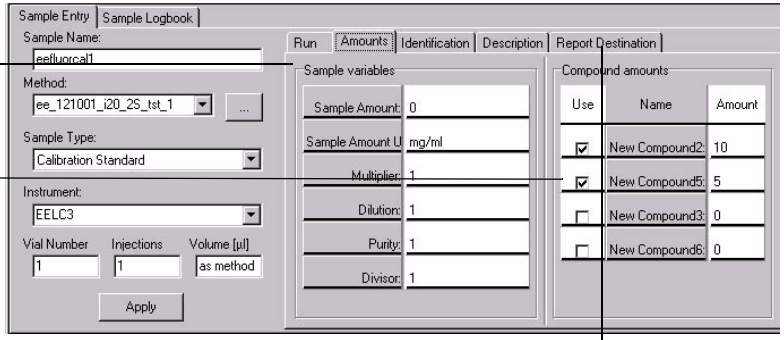
Calibration updates (Kalibrieraktualisierungen) – Sie können die Stufe und Art der Aktualisierung für die Kalibrierstandards wählen.



Sample variables (Probenvariablen) – Sie können die Probenmenge und die Werte für jeden Multiplikator oder Divisor, die als Probenvariablen in der Methode benannt sind, eingeben.

Compound amounts (Substanzmengen) – Wenn Sie in der Kalibriermethode die Variable Substanzmenge definiert haben, können Sie auch diese Mengen ändern.

Report Destination (Reportausgabeeinheit) - Informationen zum Einrichten, Erzeugen und Drucken von Reports finden Sie in Kapitel 4, "Methodenerstellung".



Speichern des Probeneintrags Mit einem Klick auf die Schaltfläche **Apply** im Arbeitsbereich Sample Entry fügen Sie die Probeninformationen in die Probentabelle ein; die Schaltfläche **Save** speichert die Eingaben und Änderungen in der Datenbank.

Sample Logbook (Probenlogbuch) Wenn Sie Ihre Probe in der Cerity NDS Datenbank speichern, verlangt das Auditing von Cerity NDS für die pharmazeutische QA/QC von Ihnen eventuell eine Auditbegründung und Ihre elektronische Signatur, bevor Sie die Probe analysieren können. Eine Beschreibung der Änderungen wird in das **Sample Logbook** eingetragen.

Sequenzeingabe

Neue Sequenzen Mit der Schaltfläche **New** können Sie auch neue Sequenzen erstellen.

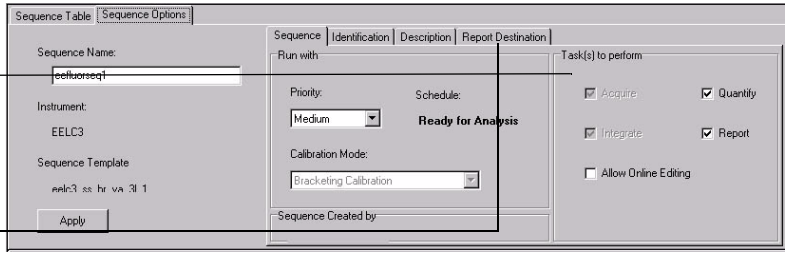
Nach dem Erstellen einer Sequenz können Sie die Angaben dazu an drei Stellen eintragen:

- Probenansicht unter Sample Entry
- Probenansicht im Ordner Instrument
- Geräteansicht im Ordner Instrument

Sequence options (Sequenzoptionen) Sie können die Probeninformationen in demselben **Sample Entry**-Fenster eintragen wie für Einzelproben, nur befinden sich in diesem Fall die **Tasks to perform** (auszuführenden Aufgaben) und die **Report Destination** (Reportausgabeeinheit) unter Sequence Options.

Run tasks to perform (auszuführende Aufgaben) – Diese sind gleich denen bei Einzelproben, aber Allow Online Editing (Onlinebearbeitung gestatten) gibt es nur bei Sequenzen.

Report Destination (Reportausgabeeinheit) – Die Reportausgabeeinheit für die ganze Sequenz geben Sie hier ein, nicht in Sample Entry.



Sequenzeintrag speichern Mit einem Klick auf die Schaltfläche **Apply** im Arbeitsbereich Sample Entry fügen Sie die Probeninformationen in die Probentabelle ein, die Schaltfläche **Save** speichert die Eingaben und Änderungen in der Datenbank.

Sobald eine Einzelprobe oder Sequenz eingetragen wurde, wird deren Versionsnummer auf 1 gesetzt. Die Versionsnummer der Einzelprobe oder Sequenz wird bei jeder Änderung erhöht.

Sequenzlogbuch Beim Speichern der Sequenz in der Cerity NDS Datenbank, verlangt das Auditing von Cerity NDS für die pharmazeutische QA/QC von Ihnen eventuell eine Auditbegründung und Ihre elektronische Unterschrift, bevor Sie die Probe analysieren können. Eine Beschreibung der Änderungen wird in das **Sequence Logbook** (Sequenzlogbuch) eingetragen.

Vorbereitung auf den Analysenlauf

Equilibrieren von Gerät und Säule

Beim Erstellen eines Gerätes wird dessen Versionsnummer auf 1 gesetzt. Die Versionsnummer erhöht sich, wenn die Konfiguration des Gerätes interaktiv ge-ändert wird.

Sie können das Gerät und die Säule im Fenster Instrument in der Geräteansicht equilibrieren.

Das Fenster Instrument zeigt ein Bild der Gerätemodule, die Sie konfigurieren können. Klicken Sie auf ein Modul, um die Menüpunkte zur Eingabe der Geräteparameter anzuzeigen. Sie können zum Beispiel die Pumpe starten oder stoppen.

Geben Sie die Equilibrierungsparameter in das Dialogfeld **Set Pump** ein. Sie können die Pumpe starten und sich die Basislinie in einer Echtzeitdarstellung ansehen.

Ist-Werte

Sie können die eingestellten und tatsächlichen Werte der Geräteparameter eines ausgewählten Gerätes sehen, wenn Sie im Menü Ansicht den Eintrag Device Actuals wählen.

Um diese Ist-Werte im Fenster **Device Actuals** anzuzeigen, wählen Sie im Menü Ansicht den Punkt **Setup Actuals Window**. Hier können Sie Einstellungen hinzufügen oder entfernen.

Echtzeitgrafik

Vor dem Start der Probe oder Sequenz stellen Sie mit einem Klick auf die Schaltfläche **Change** die Achsen und das Aussehen der Echtzeitgrafik ein.

Planung und Verfolgung von Analysenläufen

Planung von Proben und Sequenzen

Sie können Einzelproben oder Sequenzen aus folgenden Ansichtsbereichen starten:

- Im Ordner Sample Entry der Probenansicht
- Im Ordner Instrument der Probenansicht
- Im Ordner Instrument der Geräteansicht

Wählen Sie die Einzelprobe oder Probengruppe aus der Probentabelle aus. Sie starten die Analyse der Probe oder Sequenz mit der Schaltfläche Run, sobald Sie die Einzelprobe(n) oder Sequenzen gewählt haben.

Beachten Sie bei der Ablaufplanung folgende Regeln:

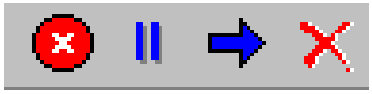
- Wenn Sie den Lauf für eine Gruppe von Einzelproben oder Sequenzen starten, beginnt die erste Probe oder Sequenz mit der Analyse. Die verbleibenden Proben oder Sequenzen werden in eine Warteschlange gestellt.
- Die Reihenfolge, in der Sie eine Probe oder Sequenz starten, bestimmt die Ablauffolge in der Warteschlange.
- Wenn Sie eine Sequenz wegen einer Probe höchster Priorität unterbrechen müssen, müssen Sie zunächst die Sequenz abbrechen. Danach setzen Sie die Probe in die erste Zeile der Arbeitsliste und starten die Probe. Im Abschnitt “Analysenlauf verfolgen” auf Seite 56 finden Sie weitere Informationen zur Arbeitsliste.
- Sie können die Ablauffolge für Einzelproben nach ihrer Priorität einstellen. Der Prioritätsstatus beginnt mit höchster Priorität, gefolgt von mittlerer Priorität und niedriger Priorität.

Sie müssen nicht extra einen Ablaufplan erstellen, um eine Probe oder Sequenz einzuplanen.

Analysenlauf verfolgen

Die Arbeitsliste

Mit der Arbeitsliste eines Gerätes können Sie den Status von Proben und Sequenzen in der Warteschlange verfolgen. Wenn Sie eine Probe oder Sequenz aus der **Worklist** (Arbeitsliste) entfernen möchten, müssen Sie den Lauf beenden oder abbrechen.



Bei einem gewählten Gerät bewirkt die Anwahl einer Probe oder Sequenz in der Arbeitsliste die Aktivierung der Schaltflächen **Abort** (Abbrechen), **Pause**, **Resume** (Fortfahren) und **Remove** (Entfernen).

Was Sie mit der Arbeitsliste machen können

Bei der Beobachtung von Proben und Sequenzen können Sie mit Hilfe der **Arbeitsliste** folgende Aufgaben durchführen:

- den Proben- und Sequenzstatus aller Geräte in der gewählten Gruppe einsehen
- den Proben- und Sequenzstatus für ein Gerät einsehen
- den Lauf einer Probe oder Sequenz abbrechen
- den Lauf einer Probe oder Sequenz pausieren
- den Lauf einer Probe oder Sequenz fortsetzen
- eine Sequenz mit der Schaltfläche **Edit Sequence** stoppen, um die Sequenz zu bearbeiten.

*Wenn Sie in der Arbeitsliste auf die Schaltfläche **Edit Sequence** klicken und es geschieht nichts, war die Auswahl Allow Online Editing (Online-Bearbeitung gestatten) in der Methode nicht aktiviert.*

Sequenzbearbeitung während des Laufs

Wenn Sie beim Einrichten der Sequenz das Kästchen **Allow Online Editing** aktivierten, können Sie in der Arbeitsliste auf die Schaltfläche **Edit Sequence** klicken, um die Sequenz während des Laufs zu ändern. Das System wird zunächst die laufende Probe abarbeiten und dann eine Pause machen, damit Sie die Sequenz bearbeiten oder neue Proben hinzufügen können. Während die Sequenz läuft, können Sie keine anderen Sequenzen oder Einzelproben für das Gerät in die Warteschlange stellen.

Wenn Sie die Sequenz fortsetzen, wird die nächste Injektion oder Sequenzzeile ausgeführt. Cerity NDS für die pharmazeutische QA/QC berechnet automatisch alle ausstehenden Abhängigkeiten (zum Beispiel Rekalibrierung, Zusammenfassung von Probengruppen) neu, um die neu hinzugefügten Injektionen einzubeziehen.

Instrument logbook (Gerätelogbuch)

Alle Ereignisse während eines Laufes werden im **Gerätelogbuch** aufgezeichnet.

Cerity für die pharmazeutische QA/QC zeichnet im **Gerätelogbuch** folgende Ereignisse auf:

- Ereignisse während eines Laufes
- Fehler
- Pause oder Abbruch des Gerätes.

Ergebnisüberprüfung

Was geschieht mit dem Ergebnis?

In *Cerity für pharmazeutische QA/QC* enthalten die Ergebnisse Rohdaten, verarbeitete Daten und Berechnungen, Methodenparameter und Angaben zu Proben und Sequenzen.

Wenn Sie ein Ergebnis überprüfen müssen, vergewissern Sie sich, dass Sie in der Ergebnisansicht auch tatsächlich den richtigen Ergebnissatz sehen. Um ein Ergebnis zu sehen, dass in der Strukturansicht nicht sichtbar ist,

- wählen Sie aus der Abfrageliste eine andere Abfrage aus
- ändern Sie eine bestehende Abfrage
- klicken Sie auf die Schaltfläche **Redo Query**, um die Auswahl zu aktualisieren
- ändern Sie den Abschnitt Data Review Layout der Methode, um das gesuchte Ergebnis einzubeziehen, und werten Sie dann nochmals aus.

Im Abschnitt "Data Review Layout (Aussehen der Datenüberprüfung)" auf Seite 107 finden Sie Einzelheiten zum Layout der Datenüberprüfung.

Anordnung der Ergebnisse in der Strukturansicht

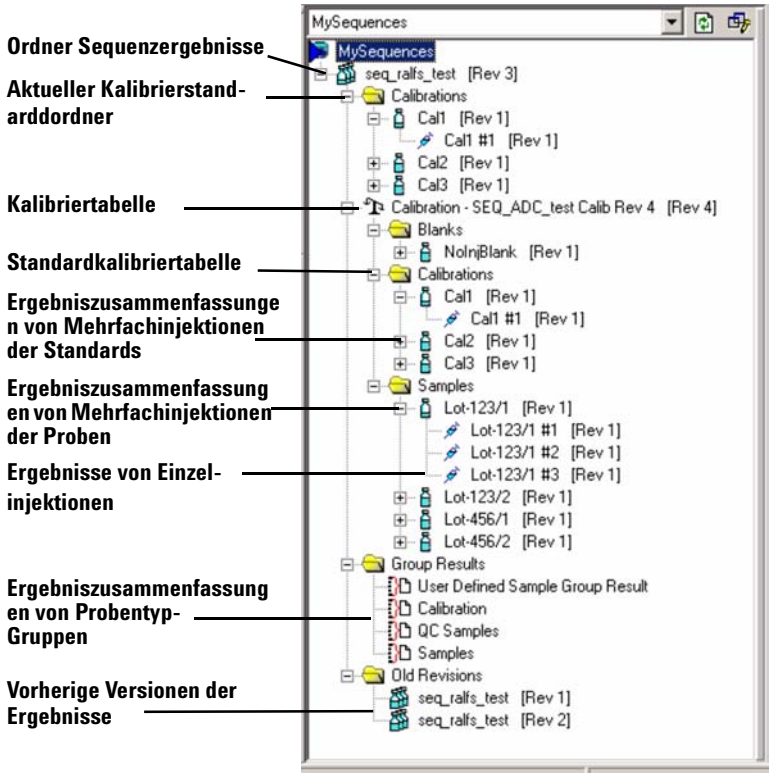


Abb. 25 Strukturansicht der Ergebnisse

HINWEIS Beachten Sie, dass der Methodenname für einzelnen Proben oder die Sequenz in dem Ordner Zusammenfassung der Kalibrierungsergebnisse gezeigt wird.

Darstellung des Kalibrierungsordners in der Ergebnisansicht

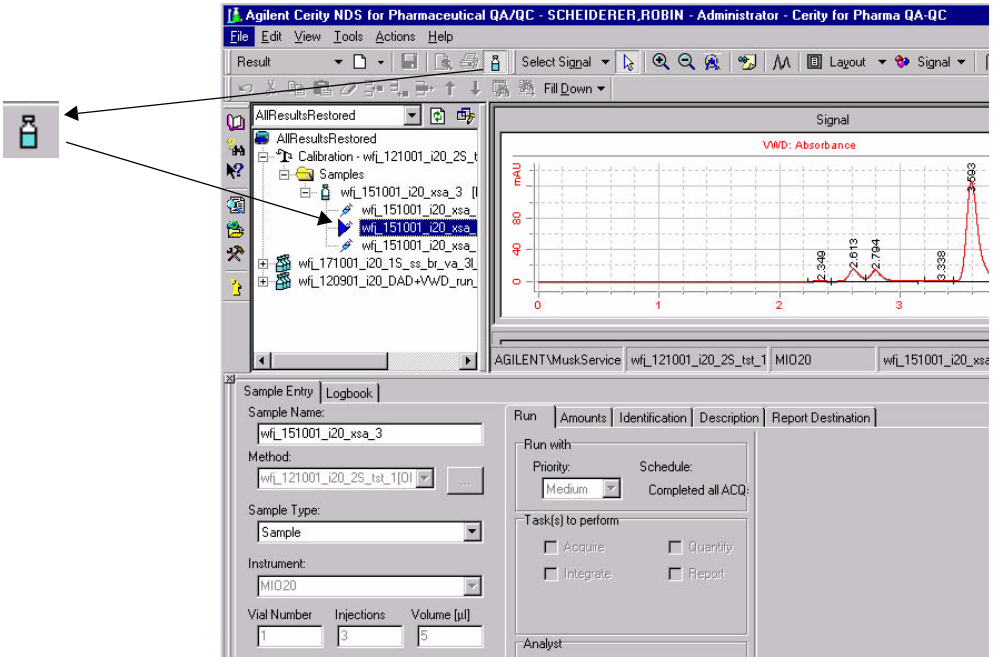
Abb. 26 zeigt die Strukturansicht der Ergebnisse mit Ordnern von Mehrfachkalibrierungen. Jeder Ordner enthält unterschiedliche Angaben:

Name	Ort	Verwendung
Aktueller Kalibrierstandardordner	Direkt unterhalb der Sequenzergebnisse	Ermöglicht das Navigieren zur aktuell sten Version eines gemessenen und benutzten Standards der Sequenz.
Kalibriertabelle	Gekennzeichnet mit dem "Waage" Symbol	Ermöglicht das Navigieren zu den Kalibriertabellen, die in der Sequenz erstellt und benutzt wurden. Kalibriertabellen, die für keine Berechnung benötigt wurden, stehen nicht zur Verfügung.
Standardkalibrier-tabelle	Unterhalb der Kalibriertabelle	Ermöglicht das Navigieren zu den Revisionen der Standards, die zum Erstellen der Kalibriertabelle verwendet wurden.

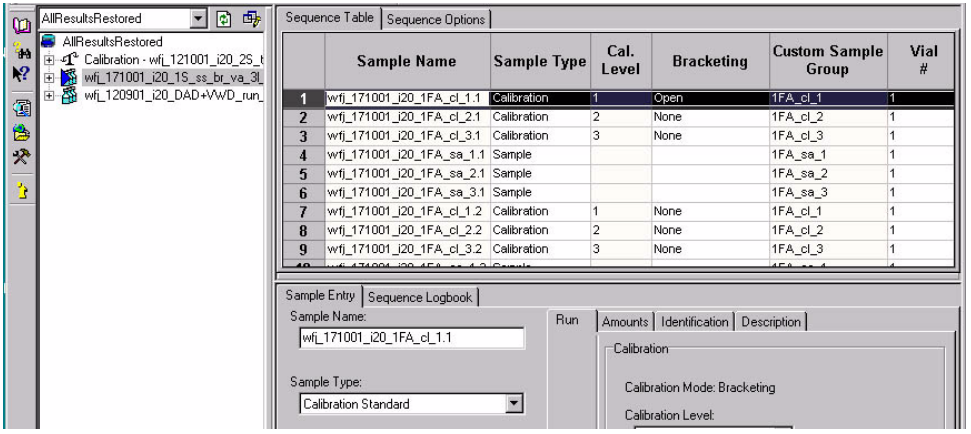
Nachdem Anfangsstart (oder Neuauswertung) einer Sequenz, sind die Versionen der aktuellen Kalibrierstandardordner und der Standardkalibriertabelle identisch. Jedoch nach einer Änderung am Standardlauf und vor der Neuauswertung sind die Versionen der Standards in den beiden Kalibrierordnern verschieden, zum Beispiel hat der Standard im aktuellen Kalibrierordner (mit der aktuellsten Standardversion) die Version 4, aber die Version 3 in der Standardkalibriertabelle (die Version des Standards in der Kalibriertabelle). Siehe auch"Versionen der Ergebnisse und Kalibriertabellen" auf Seite 73.

Überprüfung der Proben- und Sequenzinformationen

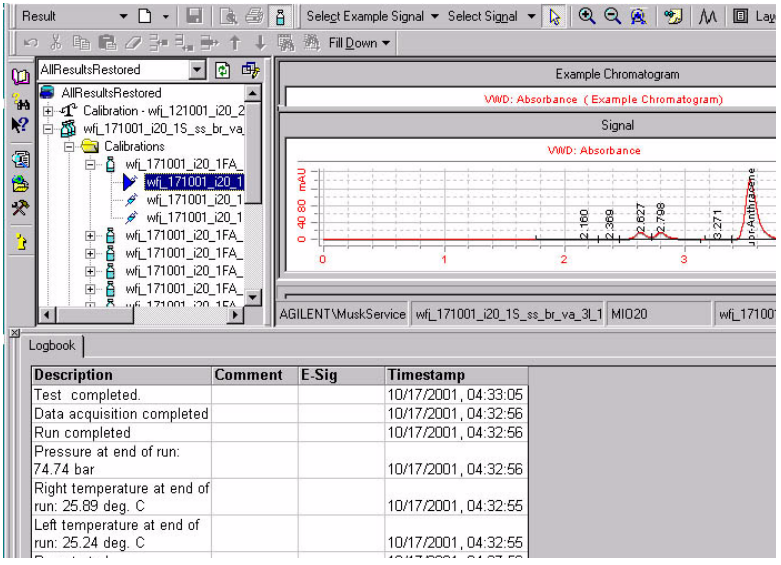
Einzelproben Da die Informationen zu Methode und Probe an die resultierenden Ergebnisse angefügt werden, sind die Probeninformationen für eine Einzelinjektion einfach zu finden. Wenn Sie auf das Symbol **Sample Details** klicken, erscheint das Fenster **Sample Entry** für die einzelne Injektion der Einzelprobe.



Sequenzen Auch in der Ergebnisansicht sind die Angaben zu Probe und Sequenz einfach zu finden. Wenn Sie das Sequenzergebnis auswählen, erscheint die Sequenztabelle und das Fenster für die Probeneingabe.



Wenn Sie das Ergebnis einer einzelnen Injektion einer Sequenz wählen und auf das Symbol **Sample Details** klicken, erscheint das **Sample Logbook** (Probenlogbuch).



Was Sie mit den Ergebnissen aus Cerity für pharmazeutische QA/QC machen können

Bei der Überprüfung, Neuberechnung und Genehmigung der Ergebnisse können Sie folgende Aufgaben ausführen:

- Überprüfung der Ergebnisse der verschiedenen Ergebnisdatensätze
- Nochmalige Integration
- Änderung der Proben- und Sequenzinformation
- Entfernung von Kalibrierpunkten
- Neuberechnung mit der Originalmethode des Ergebnisses
- Nochmalige Auswertung mit der aktuellen Version der Methode
- Eingabe von Werten für Substanzen und Probenvariablen der Methode
- Nochmalige Auswertung mit einer anderen Methode
- Import und Neuauswertung einer Agilent ChemStation oder einer ANDI-Datei
- Annahme oder Zurückweisung von Ergebnissen
- Kennzeichnung eines Ergebnisses zur Überarbeitung.

Annahme/Ablehnung von Ergebnissen

Mit Cerity für die pharmazeutische QA/QC können Sie Ergebnisse gemäß den Abläufen in Ihrer Organisation genehmigen, ablehnen oder zur Nachbearbeitung verweisen. Die Überprüfung eines Ergebnisses bestätigen Sie jeweils im Dialogfeld **Accept/Reject Results**.

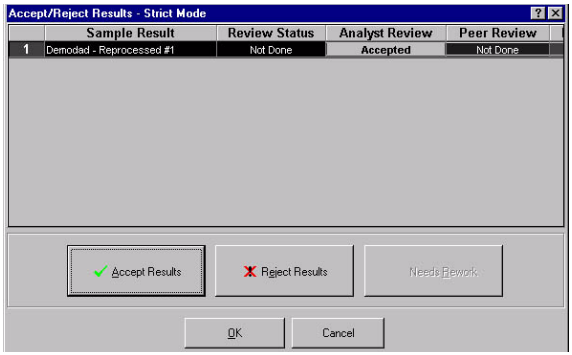


Abb. 26 Dialogfeld **Accept/Reject Results**

Die Überprüfung bezieht sich auf alle Ergebnisse einer Probe, d.h. einzelne Injektionen werden einzeln geprüft und die zusammenfassenden Ergebnisse werden der Probe oder Sequenz zugeordnet.

Annahmestufen für Proben

Es gibt bei Cerity für die pharmazeutische QA/QC für alle Ergebnisse insgesamt drei Annahmestufen:

1. Stufe 1: Überprüfung durch einen Analytiker erforderlich (erfolgt durch Benutzer der Berechtigungsstufe 1, 2 oder 3)
2. Stufe 2: Überprüfung durch einen gleichrangigen Mitarbeiter erforderlich (erfolgt durch Benutzer der Berechtigungsstufe 2 oder 3)

3 Stufe 3: Überprüfung durch einen leitenden Mitarbeiter erforderlich (erfolgt durch Benutzer der Berechtigungsstufe 3)

Überprüfungsberechtigung von Benutzern

Den Mitarbeitern kann in der Cerity NDS Administration vom Systemadministrator eine von vier Überprüfungsberechtigungen eingeräumt werden. Diese Berechtigung ermöglicht es dem Benutzer, Ergebnisse auf einer bestimmten Annahmestufe anzunehmen oder zurückzuweisen.

- 0 Keine Berechtigung zur Überprüfung
- 10 Genehmigung zur Überprüfung als Analytiker (Stufe 1)
- 20 Genehmigung zur Überprüfung als gleichrangiger Mitarbeiter oder als Analytiker (Stufe 2)
- 30 Genehmigung zur Überprüfung als leitender oder gleichrangiger Mitarbeiter oder als Analytiker (Stufe 3)

Überprüfungsmodus

Bei der Installation legt der Systemadministrator den Überprüfungsmodus als streng oder nicht streng fest.

Strenge Überprüfung

Die strenge Überprüfung ist eine systemspezifische Vorgehensweise, bei der das Labor nur die Anzahl der Genehmigungsstufen wählen kann. Der Modus der strengen Überprüfung verwendet folgende Regeln:

- Alle Annahmestufen für ein Ergebnis müssen auf *Akzeptiert* gesetzt sein, damit die Gesamtakzeptanz des Ergebnisses *Akzeptiert* lautet.
- Jede Stufe muss abgezeichnet sein, bevor die nächste Überprüfungsstufe beginnen kann (Stufe 1 muss akzeptieren vor Stufe 2, und Stufe 2 vor Stufe 3).

- Die höchste auf ein Ergebnis angewendete Annahmestufe kann jederzeit den Status des Ergebnisses von *Akzeptiert* auf *Nachbearbeitung erforderlich* verändern.

Keine strenge Überprüfung

Die weniger strenge Überprüfung ist eine laborspezifische Vorgehensweise. Der Modus der weniger strengen Überprüfung verwendet folgende Regeln:

- Es müssen nicht alle Genehmigungsstufen gesetzt werden; eine höhere Stufe kann für eine niedrigere Stufe genehmigen oder die Zurückweisung einer niedrigeren Stufe übergehen.
- Die Genehmigungstufen können in beliebiger Reihenfolge ausgeführt werden.
- Alle Überprüfer können den Prüfstatus von *Akzeptiert* auf *Nachbearbeitung erforderlich* setzen, aber nur die höchste Stufe kann den Gesamtprüfstatus auf *Nachbearbeitung erforderlich* setzen.

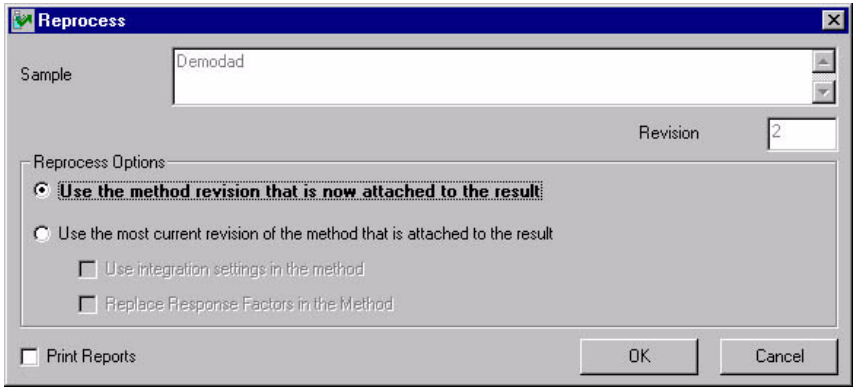
Neuauswertung von Kalibriermethoden

Neuauswertung ist ein Vorgang der Neuberechnung von Analysenergebnissen basierend auf geänderten Auswerteparametern. Sie können nur eine gewählte Einzelprobe oder Sequenz nochmals auswerten, jedoch keine einzelne Injektion oder einzelne Proben einer Sequenz.

Wenn eine Probe oder eine Sequenz überarbeitet werden muss, können Sie Änderungen an den Werten oder der Methode vornehmen und dann das Ergebnis erneut auswerten.

Verfügbare Optionen zur Neuauswertung

Alle Methodenparameter und Probeninformationen, die zur Berechnung des Ergebnisses benutzt wurden, werden dem Ergebnis hinzugefügt. Diese Struktur bestimmt die Optionen für die Neuauswertung.



Auswahl der Optionen zur Neuauswertung

Die Optionen zur Neuauswertung hängen vom Grund für die Neuauswertung ab. Wenn Sie Kalibriermethoden erneut auswerten, müssen Sie zunächst genau festlegen, welches Ziel erreicht werden soll. Benutzen Sie folgende Richtlinien bei der Auswahl:

Für Kalibrierstandards mit gerätespezifischen Kalibriermethoden:

Wenn Sie einen Kalibrierstandard mit einer einzigen Probe neu auswerten oder eine gerätespezifische Sequenz mit Kalibrierstandards und Ihre Änderungen die folgenden Quantifizierungen beeinflussen sollen, wählen Sie die Option **Use the most current revision of the method that is attached to the result** und (wichtig!) markieren das Auswahlkästchen **Replace Response Factors in the Method**.

Wenn Ihre Neukalibrierung nicht die Methode beeinflussen soll, lassen Sie das Auswahlkästchen **Replace Response Factors in the Method** unmarkiert und wählen die Option **Use the method revision that is now attached to the result.** Dies vermeidet eine Auswirkung der Neukalibrierung auf die Methode. Nur wenn Sie Methodenänderungen für die Proben/Sequenz-Quantifizierung übernehmen wollen, wählen Sie **Use the most current revision of the method that is attached to the result**.

Für 'Nicht-Kalibrierstandards' Einzelproben und Sequenzen mit speziellen Kalibriermethoden:

Wenn Sie einzelne Blindwerte, Proben oder QC Kontrollproben, nicht rekalibrierende, gerätespezifische Sequenzen oder sequenzspezifisch kalibrierte Sequenzen neu auswerten, wählen Sie die Option **Use the method revision that is now attached to the result**,

Nur in dem Falle, dass Sie eine Änderung der Kalibrierung oder anderer Methodenparameter wünschen, wählen Sie die Option **Use the most current revision of the method that is attached to the result**.

Zurücksetzen der alten Daten:

Die Option **Use the method revision that is now attached to the result** kann auch zum Zurücksetzen der vorherigen Berechnungen verwendet werden. Dies ist nützlich zur Anzeige alter Ergebnisse aus früheren Jahren für eine Neuauswertung. Dies belegt auch, dass seit damals nichts an den Ergebnissen geändert worden ist.

In der Tabelle 2 finden Sie die Optionen zur Neuauswertung, die Sie bei besonderen Fällen benötigen.

Tabelle 2 Benutzen Sie diese Tabelle zur Auswahl der Optionen zur Neuauswertung je nach Ziel der Kalibrierung

Wenn Ihr Grund zur Neuauswertung folgender ist:	Dann machen Sie dies:	Cerity für pharmazeutische QA/QC macht dies:
• Ändern einiger Integrationseinstellungen für bestimmte Injektionen • Eintragen neuer Werte in die Probeneingabefelder • Entfernen von Kalibrierstandards aus den Kalibrierdatenr • Auswerten einre Probe oder Sequenz, die aufgenommen aber nur zum Teil oder gar nicht ausgewertet wurde.	• Wählen Sie nach den Änderungen die Option zur Neuauswertung. **Benutzen Sie die Methodenversion, die nun zum Ergebnis gehört**.	**a** Die Kalibriertabelle wird mit der anfänglichen Kalibriertabelle der Probe oder Sequenz initialisiert. **b** Bei gerätespezifischen Methoden und aktueller Kalibriertabelle wird die Methode entsprechend den Einstellungen und den Kalibrierstandards aktualisiert. In allen anderen Fällen wird ein neuer Kalibriersatz, getrennt von der Methode erstellt. Die als ungültig gekennzeichneten Standards im Arbeitsbereich Kalibrierung werden NICHT benutzt. **c** Die Quantifizierung, benutzerdefinierte Berechnungen und Grenzwerte werden berechnet.

Tabelle 2 Benutzen Sie diese Tabelle zur Auswahl der Optionen zur Neuauswertung je nach Ziel der Kalibrierung (fortsetzung)

Wenn Ihr Grund zur Neuauswertung folgender ist:	Dann machen Sie dies:	Cerity für pharmazeutische QA/QC macht dies:
• Verwendung neuer Integrationseinstellungen in der aktuellsten Methodenversion für alle Injektionen • Neuauswertung alter Sequenzdaten mit einer neuen Kalibriertabelle in der aktuellsten Methodenversion.	• Wählen Sie die Optionen zur Neuauswertung. **Benutzen Sie die aktuellste Methodenversion, die zum Ergebnis gehört**.	**a** Die Kalibriertabelle wird mit der aktuellsten Version der Kalibriertabelle der Methode initialisiert. **b** Wenn die Daten der Neuauswertung aus einer früheren Kalibrierversion stammen, oder wenn die Methode sequenzspezifisch ist und Sie die Methode aktualisieren möchten, wählen Sie das Auswahlkästchen **Replace the response factors in the method**. In allen anderen Fällen wird die Methode automatisch aktualisiert. Die als ungültig gekennzeichneten Standards im Arbeitsbereich Kalibrierung werden NICHT benutzt. **c** Die Kalibrierstandards werden mit der aktuellsten Version der Kalibriertabelle quantifiziert. **d** Die Quantifizierung, benutzerdefinierte Berechnungen und Grenzwerte werden mit den neuen Einstellungen der Methode berechnet.
• Erneute Auswertung der Daten mit einer erneuerten Methodenversion, die neue Probenvariablen beinhaltet (kein Einfluss auf die Kalibrierung).	• Nachdem Sie Ihre Methodenänderungen durchgeführt haben, richten Sie die Neuauswertung für die neuen Probeneinträge ein. • Tragen Sie die Werte für die neuen Probenvariablen ein und wählen die Option für die Neuauswertung. **Benutzen Sie die Methodenversion, die nun mit dem Ergebnis verbunden ist**.	• Führt dieselben Schritte wie oben durch. • Jede andere Änderung wird sowohl für diesen Abschnitt als auch für oben benutzt. Da Cerity für pharmazeutische QA/QC die aktuellste Version einer Methode dem Ergebnis hinzufügt, wenn Sie die Auswertung für neue Probenfelder einrichten, wählen Sie die Methodenversion aus, die nun mit dem Ergebnis verbunden ist.

Tabelle 2 Benutzen Sie diese Tabelle zur Auswahl der Optionen zur Neuauswertung je nach Ziel der Kalibrierung (fortsetzung)

Wenn Ihr Grund zur Neuauswertung folgender ist:	Dann machen Sie dies:	Cerity für pharmazeutische QA/QC macht dies:
• Erneute Auswertung der Daten mit einer erneuerten Methodenversion, die neue Substanzen beinhaltet (beeinflusst die Kalibrierung).	• Nachdem Sie Ihre Methodenänderungen durchgeführt haben, richten Sie die Neuauswertung für die neuen Probeneinträge ein. • Tragen Sie die Werte für die neuen Probenvariablen ein und wählen Sie die Option für die Neuauswertung. **Benutzen Sie die Methodenversion, die nun mit dem Ergebnis verbunden ist**.	**a** Die Ergebnisse einzelner Injektionen werden mit den Methodeneinstellungen reintegriert. **b** Die Kalibriertabelle wird gemäß den Methodeneinstellungen und den Kalibrierstandards der Sequenz aktualisiert. Die als ungültig gekennzeichneten Standards im Arbeitsbereich Kalibrierung werden benutzt. **c** Die Quantifizierung, benutzerdefinierte Berechnungen und Grenzwerte werden mit den neuen Einstellungen der Methode berechnet. Jede andere Änderung wird ebenso benutzt.
• Neuauswertung mit Hilfe einer anderen Methode.	• Richten Sie die Neuauswertung für eine andere Methode ein. • Tragen Sie alle Werte für die Probenvariablen oder Substanzmengen in die neue Methode ein und wählen Sie die Option für die Neuauswertung aus. **Benutzen Sie die Methodenversion, die nun mit dem Ergebnis verbunden ist**.	**a** Die Ergebnisse einzelner Injektionen werden mit den Methodeneinstellungen reintegriert. **b** Die Kalibriertabelle wird gemäß den Methodeneinstellungen und den Kalibrierstandards der Sequenz aktualisiert. Die als ungültig gekennzeichneten Standards im Arbeitsbereich Kalibrierung werden benutzt. **c** Die Quantifizierung, benutzerdefinierte Berechnungen und Grenzwerte werden mit den neuen Einstellungen der Methode berechnet. Jede andere Änderung wird ebenso benutzt.

VORSICHT Wenn Sie mit einer unterschiedlichen Methode neu auswerten, wird ein zusätzlicher Kalibrierungsknoten mit gleichem Namen in die Strukturansicht eingefügt.

Reintegration

Die Anwendung für die pharmazeutische QA/QC enhält Werkzeuge für die Reintegration. Damit können Sie Änderungen bei anfänglichen Ereignissen sowie zeitlich gesteuerte Ereignisse für Ergebnisse reintegrieren oder mit Hilfe von Autointegrieren die Integrationsparameter durch das System setzen lassen. Sie können aber auch einzelne Peaks manuell mit eigener Basislinie integrieren. Die neuen Einstellungen und Ergebnisse speichern Sie in der Datenbank. Sie müssen die Ergebnisse allerdings wegen der Rekalibrierung und Requantifizierung erneut auswerten.

Versionen der Ergebnisse und Kalibriertabellen

Um die Neuauswertung von Ergebnissen nachvollziehen zu können, müssen Sie mit der Versionsnummerierung der Ergebnisse und Kalibriertabellen vertraut sein.

Ergebnisversion

Beim Erstellen einer Einzelprobe oder Sequenz wird ihre Versionsnummer automatisch auf 1 gesetzt. Die Versionsnummer erhöht sich mit jeder Speicherung der Einzelprobe oder Sequenz in der Datenbank. Der Lauf einer Einzelprobe oder Sequenz erhöht die Versionsnummer um eins.

Das erzeugte Ergebnis hat dieselbe Versionsnummer wie die gelaufene Einzelprobe oder Sequenz. Dies ist deshalb der Fall, weil das Ergebnis die Version aller Proben-, Sequenz- und Methodeninformationen der gelaufenen Einzelprobe oder Sequenz enthält. Die Versionsnummer des Ergebnisses wird erhöht, wenn einer oder mehrere Parameter im Ergebnis geändert werden.

Versionsänderungen im Ergebnis-Kontext

Einfache Aktualisierungssequenz (keine Klammerbildung)

Tabelle 3 Versionsänderungen bei einer einfachen Aktualisierungssequenze

Schritt	Aktion (immer mit *Save to database*)	Ansicht	Versionsnummern		
			Sequenz	Probe	Injektion Chromatogramm
1	Erstellen einer Sequenz	Sample	1	N/A	N/A
2	Eine Probe in die Sequenztabelle einfügen	Sample	2	N/A	N/A
3	Änderung der Substanzmenge für eine Probe in der Sequenztabelle	Sample	3	N/A	N/A
4	Sequenzakquisition am Gerät		4	1	1
5	Änderung der Probenmenge einer Probe	Result	5	1	1
6	Manuelle Integration des Chromatogramms einer Injektion	Result	6	2	2
7	Neuauswertung der Sequenz	Result	8*	3	3
8	Änderung der Probenmenge einer Probe	Result	9	3	3
9	Manuelle Integration des Chromatogramms einer Injektion	Result	10	4	4
10	Neuauswertung der Sequenz	Result	12*	5	5

* Die Neuauswertung erhöht die Version entsprechend der internen Abläufe um zwei.

Klammersequenz

Bei einer Klammersequenz unterscheidet sich die Versionsführung wie folgt:

Versionsführung der Kalibrierstandards:

- Standards einer **öffnenden** Klammer tragen die Version der Probe und das Chromatogramm erhöht sich um eins.
- Standards, die für eine **schließende und öffnende** Klammer verwendt werden, tragen die Version der Probe und das Chromatogramm erhöht sich um zwei.

Versionsführung bei berechneten Unbekannten (einschließlich QC und Leerproben):

- Die Version wird nach der Berechnung des Ergebnisses um eins erhöht.

Sequenz mit umfassender Klammer

Versionsführung der Kalibrierstandards:

- Die Standards haben nach der Messung die Version 1.

Versionsführung bei berechneten Unbekannten (einschließlich QC und Leerproben):

- Die Version wird mit der Berechnung des Ergebnisses um eins erhöht, sie wird zum Beispiel Version 2 nach der anfänglichen Akquisition.

Versionen der Kalibriertabelle

Beim Erstellen einer Kalibriertabelle wird die Versionsnummer auf 1 gesetzt. Die Versionsnummer wird erhöht, wenn die Kalibriertabelle erneuert wird. Das folgende Beispiel illustriert die Versionssteuerung der Kalibriertabelle. In allen Fällen geht die Tabelle von einer Injektion pro Standard aus. Die Versionsnummer der Kalibriertabelle wird mit jeder Analyse einer Kalibrierprobe erhöht. Bei sequenzspezifischen Kalibrierungen ist n immer 1.

Tabelle 4 Einzelne Aktualisierung der Kalibrierung

Sequenzfolge	Probenname	Version der Kalibriertabelle	
		alt	neu
1	Standard 1, Lauf 1	n	n+1
2	Standard 2, Lauf 1	n+1	n+2
3	Probe 1a	n+2	
4	Probe 1b	n+2	
5	Standard 1, Lauf 2	n+2	n+3
6	Standard 2, Lauf 2	n+3	n+4
7	Probe 2a	n+4	

Tabelle 4 Einzelne Aktualisierung der Kalibrierung (fortsetzung)

Sequenzfolge	Probenname	Version der Kalibriertabelle	
		alt	neu
8	Probe 2b	n+4	
9	Standard 1, Lauf 3	n+4	n+5
10	Standard 2, Lauf 3	n+5	n+6

Tabelle 5 Klammerkalibrierung

Sequenzfolge	Probenname	Version der Kalibriertabelle		Klammer
		alt	neu	
1	Standard 1, Lauf 1	n	n+1	1 offen
2	Probe 1a	n+2		1
3	Probe 1b	n+2		1
4	Standard 1, Lauf 2	n+1	n+2/n+3*	1 geschlossen, 2 offen
5	Probe 2a	n+4		2
6	Probe 2b	n+4		2
7	Standard 1, Lauf 3	n+3	n+4	2 geschlossen

* Version n+2 beim Schließen der Klammer 1, Version n+3 beim Beginn der Klammer 2.

Die Versionsnummer der Kalibriertabelle wird mit jeder Änderung geändert. Bei der Klammerbildung werden Zwischenversionen der Kalibrierdaten erzeugt, die nicht direkt für die Kalibrierung der Proben verwendet werden (zum Beispiel Version 3 in Tabelle 5).

Tabelle 6 Gesamtklammerkalibrierung

Sequenzfolge	Probenname	Version der Kalibriertabelle	
		alt	neu
1	Standard 1, Lauf 1	n	n+1
2	Probe 1a	n+3	
3	Probe 1b	n+3	
4	Standard 1, Lauf 2	n+1	n+2
5	Probe 2a	n+3	
6	Probe 2b	n+3	
7	Standard 1, Lauf 3	n+2	n+3

Bei der Gesamtklammerbildung werden die Proben erst quantifiziert, wenn alle Standards analysiert sind. Dies bedeutet, dass die Kalibriertabelle beim Start der Sequenz initialisiert und dann zweimal aktualisiert wird (Zeile 4 und 7); daraus ergeben sich die Versionsnummern 2 und 3. Die Proben werden mit der Version 3 quantifiziert, die der Mittelwert aller Kalibrierpunkte ist.

Um eine gleichbleibende chromatographische Leistung des Systems beizubehalten, sollten die Kalibrierstandards gleichmäßig über die Sequenz verteilt werden. Probleme mit der Kalibrierpräzision können mit entsprechender Statistik oder Responsefaktoren ermittelt werden.

Versionsführung und Nachvollziehbarkeit bei Sequenzen

In Cerity NDS werden alle Daten entweder als Einzelinjektionen oder als Sequenzen verwaltet. Jede Änderung an einer Sequenz wird in einer neuen Sequenzversion dokumentiert. Die Sequenzversion dokumentiert aber nicht die Änderungen an einzelnen Läufen der Sequenz; diese Änderungen werden in den Logbüchern der einzelnen geänderten Läufe protokolliert. Daher gibt es keine direkte Beziehung zwischen der Sequenzversion und den Änderungen innerhalb der Sequenz.

Arbeiten an einer Sequenz werden in einem Sequenz-Logbuch dokumentiert. Jede Sequenz besitzt nur ein Sequenz-Logbuch, in dem alle Änderungen auf Sequenzebene protokolliert werden. Das Logbuch zeigt immer alle Einträge. Dies bedeutet, dass alte Sequenzversionen alle Einträge zeigen, einschließlich jener jüngerer Versionen. Dies erschwert es, Änderungen an einer Sequenz zu verfolgen.

Alte Sequenzversionen werden unter dem aktuellen Sequenzeintrag dokumentiert und angezeigt. Die alten Sequenzversionen zeigen nicht die entsprechenden Läufe und deren Änderungen; diese Informationen befinden sich nur in den jeweiligen Proben-Logbüchern.

Die Versionsführung bei den Sequenzen erzeugt auch mehr Versionen als erwartet. Versionen werden für zwei Änderungsarten erzeugt:

- Externe Änderungen: Ergebnisänderungen durch den Benutzer, z.B. nach Reintegration eines Probechromatogramms.
- Interne Änderungen: Änderung des Sequenzstatus, z.B. Wechsel der Ergebnisüberprüfung der Sequenz in “ready for reprocessing (Fertig zur Neubearbeitung)”.

Beide Änderungsarten erzeugen eine neue Sequenzversion. Sequenzversionen auf Grund von externen Änderungen sind einfach zu verstehen und nachzuvollziehen. Sequenzversionen

auf Grund von internen Änderungen sind für den Benutzer unsichtbar und daher schwieriger zu verstehen und nachzuvollziehen.

Dieser Abschnitt beschreibt an einem Beispiel, wie Sie alle Sequenzversionen nachvollziehen und erklären können. Mit einer schrittweisen Anleitung können Sie mittels vorhandener Cerity NDS Werkzeuge eine vollständige Sequenz-Historie nachvollziehen.

Schrittweise Anleitung zum Nachvollziehen von Sequenzversionen

Schritt 1 Ermittlung interner Sequenzversionen, die die Sequenz nicht ändern

Sie Sequenzdarstellung in Cerity NDS ist wie folgt organisiert. Der Sequenzname bildet die oberste Hierarchieebene in der Sequenz-Historie. Durch Anwahl und Öffnen des Sequenzknotens werden alle Untereinheiten der Sequenz angezeigt. Diese Untereinheiten sind Tests/Ergebnisse, die für die aktuelle Version zusätzlich zu älteren Sequenzversionen gemacht worden sind. Um alle Unterverzeichnisse eines Sequenzknotens gleichzeitig zu öffnen, markieren Sie die betreffende Sequenz und betätigen Sie die Sterntaste (*) der Tastatur. Sie erhalten alle Ergebnisse der aktuellen Sequenzversion (in diesem Beispiel rev 15 der Sequenz Demosequence1ac-TestCase) unter dem Eintrag der aktuellen Sequenzversion rev 15 (siehe Abb. 28 auf Seite 81). Hier sind alle Probenergebnisse mit ihren aktuellen Versionsnummern eingetragen. Somit kann das aktuelle Ergebnis ermittelt und erklärt werden. Abb. 27 auf Seite 80 zeigt die Sequenz-Übersicht mit allen Unterordnern in ihrer letzten Version.

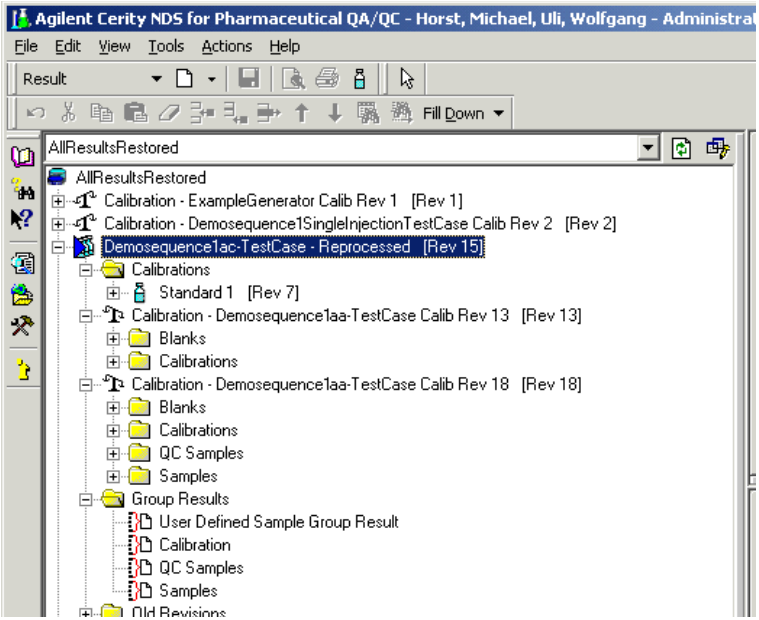


Abb. 27 Darstellung der Anfangssequenz mit allen geöffneten Ordnern

Abb. 28 auf Seite 81 zeigt alle vorhergehenden Sequenzversionen. Sie befinden sich im Unterordner “Old Revisions”. Die Beispielsequenz beinhaltet 14 alte Versionen. Nun müssen wir die Gründe und Aktionen ermitteln, die zur Bildung dieser Versionen geführt haben.

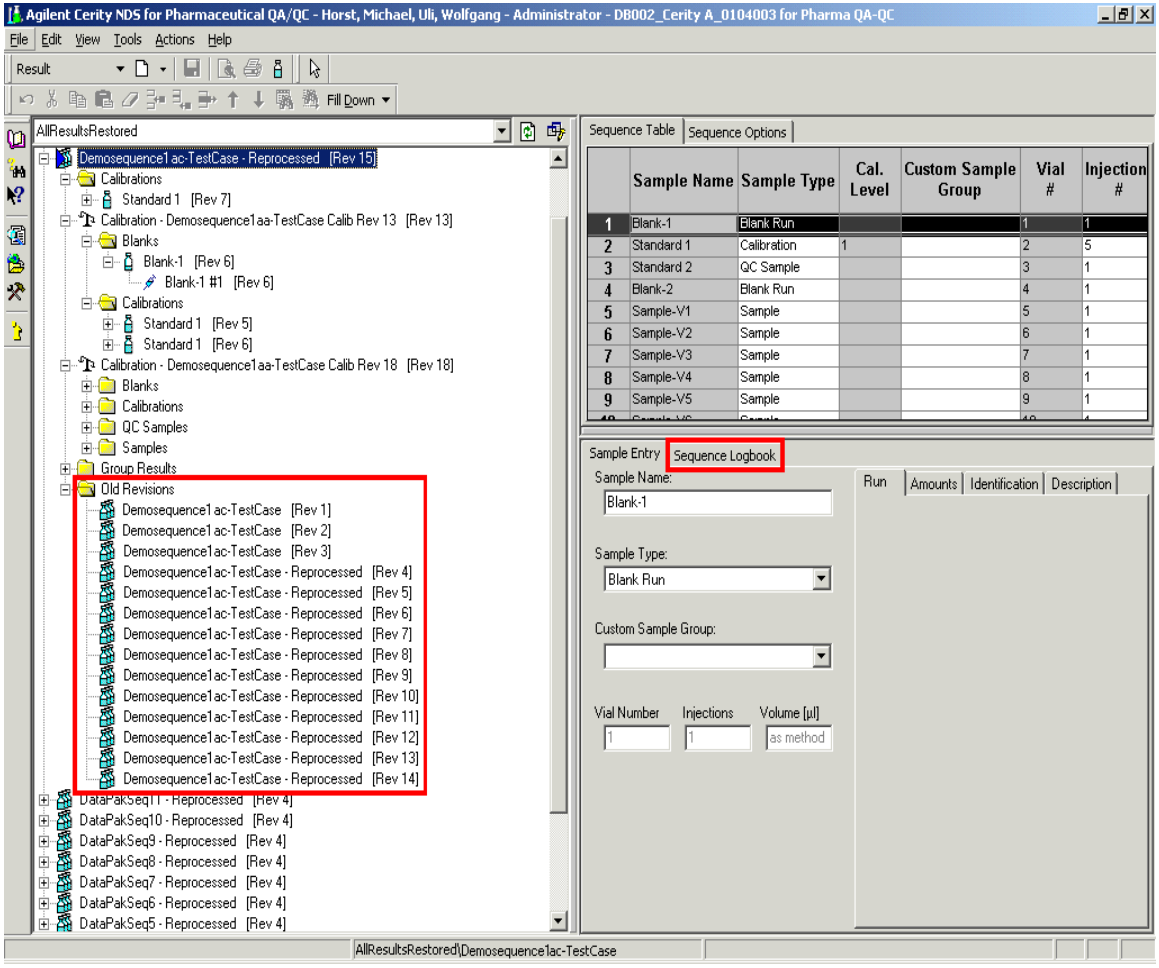


Abb. 28 Alte Sequenzversionen

Zur Ermittlung der Gründe für die Versionen ist eine Kombination aus den Eintragungen des Sequenz-Logbuches, der Proben-Logbücher und der Versionsnummerierung erforderlich. Der erster Schritt der Versionsverfolgung besteht in der Identifizierung der “internen” Versionen. Diese werden von Cerity NDS auf Grund organisatorischer Änderungen (zum Beispiel Übergabe zur Ausführung) erstellt, bewirken aber keine Änderung der Aufzeichnung. Die Cerity Software führt diese Sequenzänderungen als Teil ihrer Gesamtfunktionalität aus.

Ein Beispiel für die Bildung einer “internen” Version ist die Einplanung und Ausführung einer Sequenz zur Datenaufnahme. Nach Abschluss der Dateneingaben für die Sequenz und ihrer Übergabe an das Akquisitionssystem führt Cerity NDS eine interne Statusänderung der Sequenz durch (von “data entry (Dateneingabe)” auf “ready for acquisition (Fertig zur Messung)”). Die nächste Statusänderung erfolgt von “ready for acquisition” auf “acquisition started (Messung gestartet)” für ein gewähltes Gerät. Der Benutzer nimmt nur einen Vorgang wahr, nämlich “Die Sequenz ist gestartet”. Cerity NDS sieht darin jedoch zwei Aktionen und dokumentiert dies mit zwei Sequenzversionen. Die Bildung interner Versionen erfolgt bei jeder Sequenzausführung unabhängig davon, ob es sich um eine Messwerterfassung oder eine Neubearbeitung handelt (siehe auch “Versionsänderungen im Ergebnis-Kontext” auf Seite 74). Am schnellsten erkennt man eine Sequenzversion anhand der Versions-Zeitmarke im Sequenz-Logbuch, siehe Abb. 29 auf Seite 83. Das Erstellen der Zeitmarke für die Version ist der erste Schritt zur aktuellen Sequenzversion Diese hochrangige Information umfasst den aktuellen Sequenzstatus, den Sequenzlieferanten und die Zeitangabe der Änderung in der Datenbank (siehe Abb. 29 auf Seite 83). Die anfängliche Versions-Zeitmarke dokumentiert für eine einfache Rückverfolgung auch den Benutzer und den Benutzernamen.

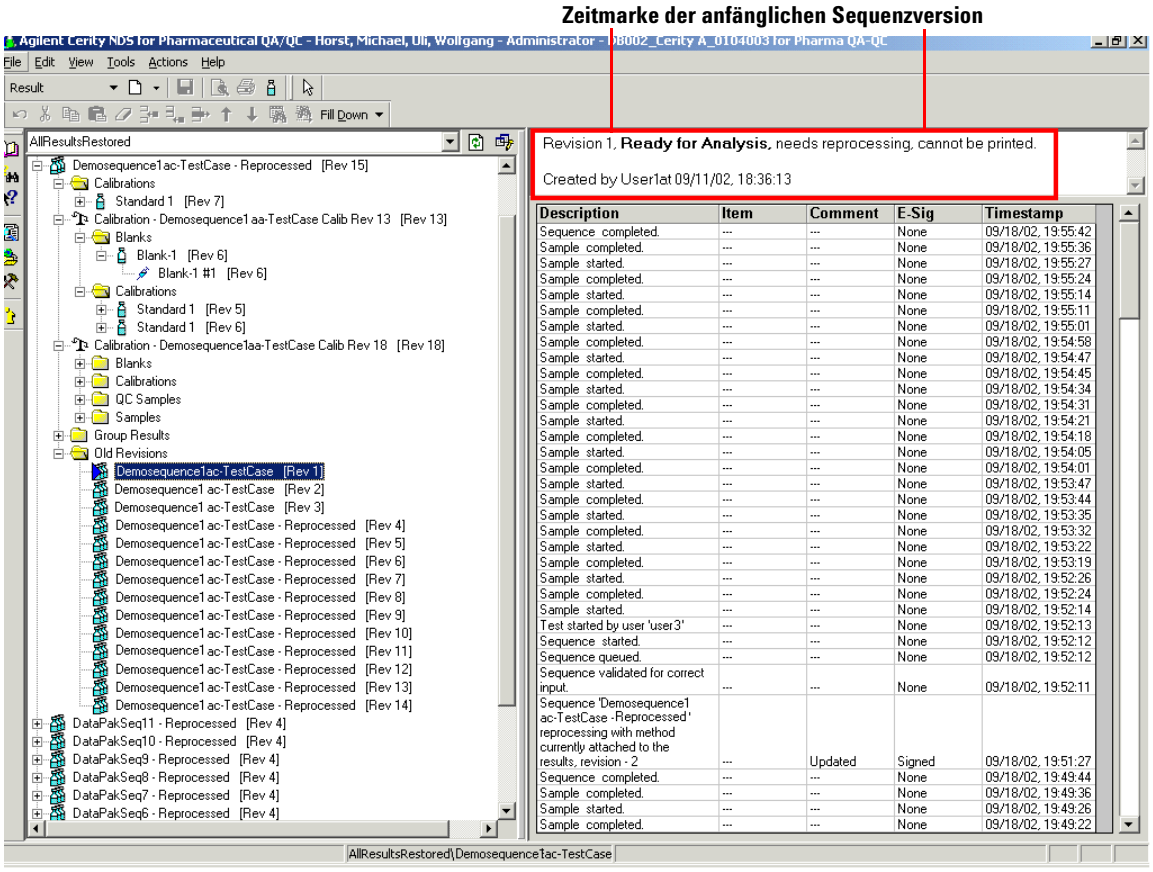

Zeitmarke der anfänglichen Sequenzversion
Agilent Cerity NDS for Pharmaceutical QA/QC - Horst, Michael, Uli, Wolfgang - Administrator -
File Edit View Tools Actions Help
Result
Fill Down
AllResultsRestored
Demosequence1ac-TestCase - Reprocessed [Rev 15]
Calibrations
Standard 1 [Rev 7]
Calibration - Demosequence1 aa-TestCase Calib Rev 13 [Rev 13]
Blanks
Blank-1 [Rev 6]
Blank-1 #1 [Rev 6]
Calibrations
Standard 1 [Rev 5]
Standard 1 [Rev 6]
Calibration - Demosequence1aa-TestCase Calib Rev 18 [Rev 18]
Blanks
Calibrations
QC Samples
Samples
Group Results
Old Revisions
Demosequence1ac-TestCase [Rev 1]
Demosequence1 ac-TestCase [Rev 2]
Demosequence1 ac-TestCase [Rev 3]
Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 4]
Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 5]
Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 6]
Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 7]
Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 8]
Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 9]
Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 10]
Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 11]
Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 12]
Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 13]
Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 14]
DataPakSeq11 - Reprocessed [Rev 4]
DataPakSeq10 - Reprocessed [Rev 4]
DataPakSeq9 - Reprocessed [Rev 4]
DataPakSeq8 - Reprocessed [Rev 4]
DataPakSeq7 - Reprocessed [Rev 4]
DataPakSeq6 - Reprocessed [Rev 4]
Revision 1, Ready for Analysis, needs reprocessing, cannot be printed.
Created by User1at 09/11/02, 18:36:13
Description Item Comment E-Sig Timestamp
Sequence completed. --- --- None 09/18/02, 19:55:42
Sample completed. --- --- None 09/18/02, 19:55:36
Sample started. --- --- None 09/18/02, 19:55:27
Sample completed. --- --- None 09/18/02, 19:55:24
Sample started. --- --- None 09/18/02, 19:55:14
Sample completed. --- --- None 09/18/02, 19:55:11
Sample started. --- --- None 09/18/02, 19:55:01
Sample completed. --- --- None 09/18/02, 19:54:58
Sample started. --- --- None 09/18/02, 19:54:47
Sample completed. --- --- None 09/18/02, 19:54:45
Sample started. --- --- None 09/18/02, 19:54:34
Sample completed. --- --- None 09/18/02, 19:54:31
Sample started. --- --- None 09/18/02, 19:54:21
Sample completed. --- --- None 09/18/02, 19:54:18
Sample started. --- --- None 09/18/02, 19:54:05
Sample completed. --- --- None 09/18/02, 19:54:01
Sample started. --- --- None 09/18/02, 19:53:47
Sample completed. --- --- None 09/18/02, 19:53:44
Sample started. --- --- None 09/18/02, 19:53:35
Sample completed. --- --- None 09/18/02, 19:53:32
Sample started. --- --- None 09/18/02, 19:53:22
Sample completed. --- --- None 09/18/02, 19:53:19
Sample started. --- --- None 09/18/02, 19:52:26
Sample completed. --- --- None 09/18/02, 19:52:24
Sample started. --- --- None 09/18/02, 19:52:14
Test started by user 'user3' --- --- None 09/18/02, 19:52:13
Sequence started. --- --- None 09/18/02, 19:52:12
Sequence queued. --- --- None 09/18/02, 19:52:12
Sequence validated for correct input. --- --- None 09/18/02, 19:52:11
Sequence 'Demosequence1 ac-TestCase -Reprocessed' reprocessing with method currently attached to the results, revision - 2 --- Updated Signed 09/18/02, 19:51:27
Sequence completed. --- --- None 09/18/02, 19:49:44
Sample completed. --- --- None 09/18/02, 19:49:36
Sample started. --- --- None 09/18/02, 19:49:26
Sample completed. --- --- None 09/18/02, 19:49:22
AllResultsRestored\Demosequence1ac-TestCase

Abb. 29 Zeitmarke der anfänglichen Sequenzversion

Alle internen Sequenzversionen werden anhand einer Kombination des Status, der immer “needs reprocessing, can not be printed (Neubearbeitung erforderlich, Ausdruck nicht möglich)” ist und der Zeitmarke gekennzeichnet. Die Zeitmarke einer internen Sequenzversion iat immer identisch mit der Zeitmarke der nächsten Sequenzversion. Die nächste Sequenzversion hat stets den Status “reprocessing complete, use print report to see details (Neubearbeitung abgeschlossen, Für Einzelheiten Report drucken)”. Die Kombination dieser Einträge mit gleichen Zeitmarken kennzeichnet die erste Sequenzversion in Verbindung mit der nächsten als intern, siehe Abb. 30 auf

Seite 84.

Abb. 30 zeigt, dass die Sequenzversion 1 eine “interne” Version ist, wogegen die Sequenzversion 2 das erste druckbare Sequenzergebnis darstellt.

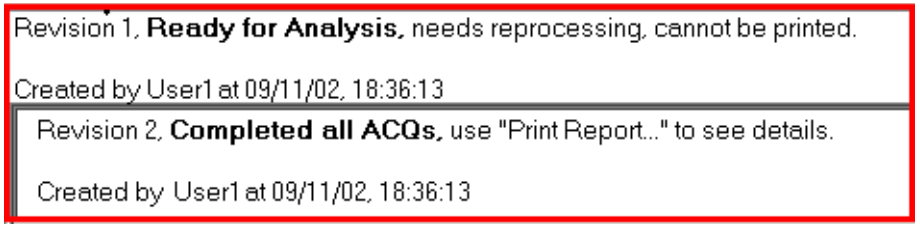

Revision 1, Ready for Analysis, needs reprocessing, cannot be printed.
Created by User1 at 09/11/02, 18:36:13
Revision 2, Completed all ACQs, use "Print Report..." to see details.
Created by User1 at 09/11/02, 18:36:13

Abb. 30 Überlagerung zweier identischer Zeitmarken von Sequenzversionen

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass alle Sequenzversionen, die durch Ausführung oder Neubearbeitung einer Sequenz entstanden sind, einfach erkannt werden können. Der Vergleich des Versionseintrages und der Zeitmarke einer Sequenzversion sowie die Kommentare dienen zur Erkennung zusätzlicher interner Sequenzversionen. Sequenzversionen mit gleicher Zeitmarke und gleicher Benutzerkennung gehören zusammen und stammen aus einer Neubearbeitung einer Sequenz. Ein Klick auf jede alte Version zeigt diese Daten und ermöglicht so die Rückverfolgung und Dokumentation aller Sequenzversionen, die bei der Ausführung oder Neubearbeitung einer Sequenz entstanden sind.

HINWEIS

Sequenzversionen, die durch Datenakquisition und Neubearbeitung entstanden sind, haben keine andere Auswirkung als neue Ergebnisse für alle Sequenz basierenden Berechnungen, zum Beispiel Mengenergebnisse. Diese Ergebnisse können zur vollständigen Dokumentation der Änderung gedruckt werden. Änderungen bei einzelnen Läufen oder der Analysenparameter werden in den entsprechenden Proben-Logbüchern protokolliert und sie erzeugen zusätzlich noch Sequenzversionen, siehe auch Schritt 2.

Schritt 2 Ermittlung aller Sequenzänderungen, die durch Änderungen an einzelnen Läufen, z.B. durch manuelle Reintegration der Standards oder Methodenänderungen, entstanden sind

Anhand der Identifizierung der Sequenzversion bei Neubearbeitungen lässt sich feststellen, dass die Sequenzversionen 3 und 8-9 durch Änderungen der Integration oder Kalibrierung der Sequenzproben verursacht worden sind. Die Identifizierung der Ergebnisänderungen erfordert sowohl die Ergebnisversion der einzelnen Proben als auch die Zeitmarke der Erzeugung der Sequenzversion. Proben kann man durch eine jeweils zusätzliche Reanalyse identifizieren, da alle Versionen eines Probenergebnisses um 1 erhöht werden, sobald die Änderung oder Neubearbeitung ausgeführt wird. Bei dem Beispiel in Abb. 31 auf Seite 86 ist die Standardversionsnummer für alle Injektionsergebnisse sechs (Version 1 bei der Datenakquisition und fünf Neubearbeitungen). Es ist wichtig zu wissen, dass alle Ergebnisversionen die gleiche Versionsnummer tragen, solange die Sequenzversionen aus einer Neubearbeitung stammen und keine individuellen Änderungen erfolgt sind.

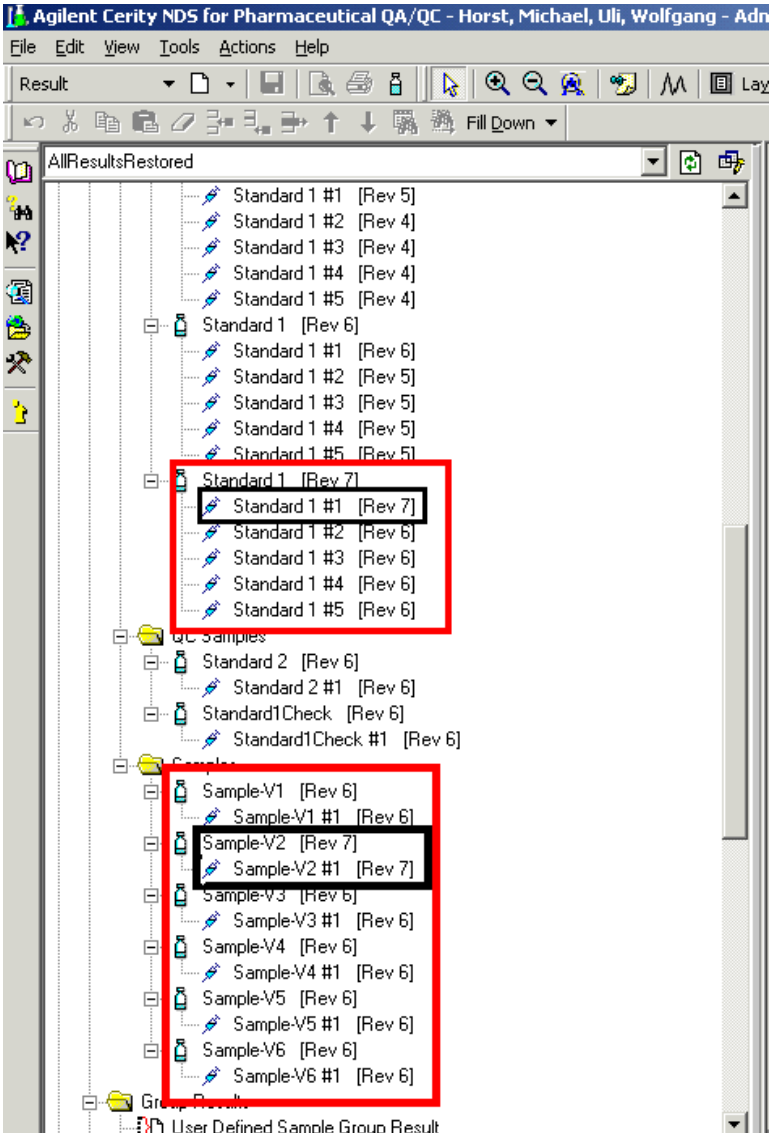

Agilent Cerity NDS for Pharmaceutical QA/QC - Horst, Michael, Uli, Wolfgang - Adr
File Edit View Tools Actions Help
Result
Fill Down
AllResultsRestored
Standard 1 #1 [Rev 5]
Standard 1 #2 [Rev 4]
Standard 1 #3 [Rev 4]
Standard 1 #4 [Rev 4]
Standard 1 #5 [Rev 4]
Standard 1 [Rev 6]
Standard 1 #1 [Rev 6]
Standard 1 #2 [Rev 5]
Standard 1 #3 [Rev 5]
Standard 1 #4 [Rev 5]
Standard 1 #5 [Rev 5]
Standard 1 [Rev 7]
Standard 1 #1 [Rev 7]
Standard 1 #2 [Rev 6]
Standard 1 #3 [Rev 6]
Standard 1 #4 [Rev 6]
Standard 1 #5 [Rev 6]
Standard 2 [Rev 6]
Standard 2 #1 [Rev 6]
Standard1Check [Rev 6]
Standard1Check #1 [Rev 6]
Sample-V1 [Rev 6]
Sample-V1 #1 [Rev 6]
Sample-V2 [Rev 7]
Sample-V2 #1 [Rev 7]
Sample-V3 #1 [Rev 6]
Sample-V4 [Rev 6]
Sample-V4 #1 [Rev 6]
Sample-V5 [Rev 6]
Sample-V5 #1 [Rev 6]
Sample-V6 [Rev 6]
Sample-V6 #1 [Rev 6]

Abb. 31 Identifizierung der Probenergebnisse mit individuellen Änderungen bei Sample V2 und Standard 1

Sobald ein einzelnes Ergebnis geändert worden ist, ist die Versionsnummer der geänderten Probe höher als die der anderen Versionen. In diesem Beispiel durchbrechen die beiden Probenversionen **V2** und **Standard 1** das “Gleichheitsgebot” für die Ergebnisse, siehe Abb. 31 auf Seite 86. Beide tragen die Versionsnummer 7, was auf einen individuellen Neubearbeitungsschritt hinweist. Das Proben-Logbuch dieser Proben zeigt die aktuellen Änderungen der jeweiligen Proben. Abb. 32 zeigt einen Ausschnitt des Proben-Logbuches für die Probe V2.

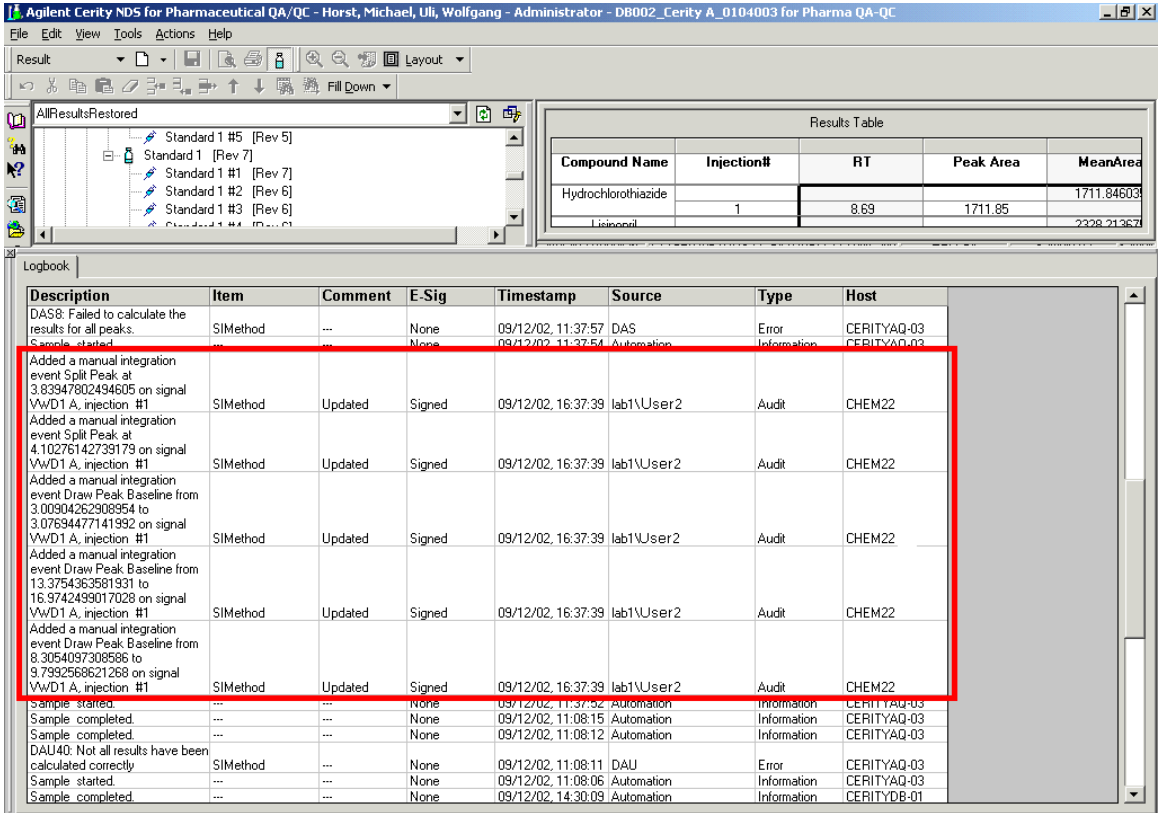


Abb. 32 Ausschnitt aus dem Proben-Logbuch der Pobe V2

Das Proben-Logbuch belegt, dass der Benutzer User2 für diese Probe manuelle Integrationsereignisse verwendet hat.

HINWEIS Diese Ereignisse werden alle mit der gleichen Zeitmarke aufgeführt, da das Logbuch die aktuelle Zeit der Aktion “Speichern in der Datenbank” nimmt und nicht die Zeit der jeweiligen Tastatureingaben.

Das Logbuch für die Probe “Standard 1” enthält, wie in Abb. 33 gezeigt, manuelle Ergebnisänderungen für diese Probe .

Logbook

Description	Item	Comment	E-Sig	Timestamp	Source	Type	Host
Signal re-integrated using the integration parameters set, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Event Time' from '0.2' to '0' for the Event Baseline at Valleys, Event Value On, Event Table VWD, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Event' from 'Area Reject' to 'Baseline at Valleys' for the Event Time 0.2, Event Value On, Event Table VWD, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Added new Timed Event Area Reject at time 0.2 with value 0 on VWD, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Deleted timed event Area Reject at time 0.2 from VWD, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Added new Timed Event Area Reject at time 0.2 with value 0 on VWD, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Signal re-integrated using the integration parameters set, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Signal re-integrated using the integration parameters set, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Signal re-integrated using the integration parameters set, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Signal re-integrated using the integration parameters set, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Signal re-integrated using the integration parameters set, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Signal re-integrated using the integration parameters set, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Signal re-integrated using the							

Abb. 33 Ausschnitt aus dem Proben-Logbuch von Standard 1

Das Logbuch in Abb. 33 auf Seite 88 zeigt nur einen Teil der Änderungen an Standard 1. Das Logbbuch zeigt eine Reihe von Änderungen, die hauptsächlich aus Änderungen der jeweiligen Integrationsereignisse und der Integrationsparameter bestehen.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass eine Überprüfung der Versionsnummern der Ergebnisläufe (Kalibrierungen, Proben und QC Proben) in der letzten Sequenzversion alle Proben zeigt, die individuell reanalysiert worden sind (wobei individuell “nicht als Teil einer vollständigen Sequenz-Neubearbeitung” bedeutet). Wenn die Anzahl der Neubearbeitungen der Sequenz ermittelt ist, ist der Standardwert der Ergebnisversion auch bekannt (als Anzahl der Neubearbeitungen plus 1 für die ursprüngliche Akquisition). Jede Probe mit einer Versionsnummer, die höher ist als die Standardnummer, muss individuell reanalysiert worden sein. Bei der Beispielsequenz sind dies die zwei Proben Standard 1 und V2. Das Logbuch zeigt die aktuellen Änderungen und ermöglicht eine vollständige Nachvollziehbarkeit der Änderungen für die Reanalyse.

Schritt 3: Zuordnung von Probenänderungen und Sequenzversionen

Bei der Zuordnung von Ergebnisänderungen und Sequenzversionen werden die Zeitmarken für die Sequenzerstellung und Sequenzänderung benutzt. Standard 1 wurde am 09/12/02 um 14:08:35 (Zeit der Speicherung) neu analysiert. Die nächste Speicherung der Sequenz erfolgte um 14:53:15. Dies bedeutet, dass die Änderungen an den Integrationsparametern für Standard 1 durch die Änderungen von Sequenzversion 2 auf Version 3 herbeigeführt wurden. Die Änderungsdokumentation für die Version 3 zeigt folgende Aktionen: geänderte Integrationsparameter für Standard 1 und ein nachfolgendes Autointegrate für diesen Standard. Die Verwendung dieser Parameter erzeugte die Sequenzversion 4 (intern) und Version 5 (vollständige Neubearbeitung).

Die manuelle Reintegration von V2 wurde um 16:37:39 gespeichert.

HINWEIS

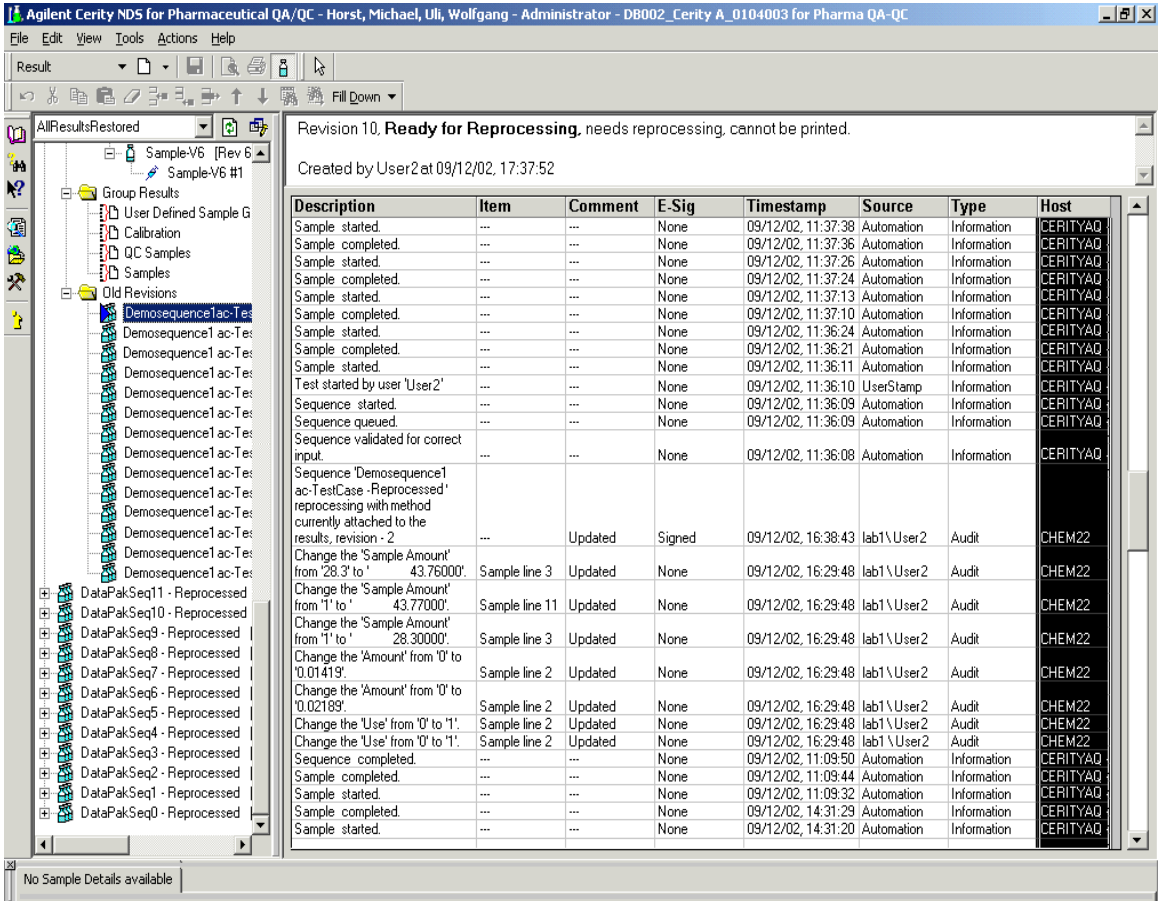
Das Zuordnen der aktuellen Ereignisse ist in diesem Beispiel sehr schwierig, da die Rechner in diesem Verbund keine Zeitsynchronisierung aufweisen. Dies kann man aus dem Logbuch durch Anzeige der Spalten “host” und Prüfung der lokalen Zeiten für die drei Rechner CHEM22, PCERITYAQ and CERITYDB ersehen.

Die zwei Reanalyseschritte erklären zwei der verbleibenden drei Sequenzversionen. Daher müssen Angaben zur letzten Sequenzversion im Sequenz-Logbuch protokolliert sein.

HINWEIS Das Speichern einzelner Probenänderungen und das Speichern der Sequenz sind unabhängige Aktionen. Dies erklärt den Zeitunterschied zwischen Ergebnisänderung und der folgenden Sequenzversion.

Step 4: Überprüfung des Sequenz-Logbuches auf Änderungen der Kalibrierung

Das Sequenz-Logbuch speichert alle für die Sequenz relevanten Ereignisse. Solche Ereignisse sind in der Regel Sequenzausführung, -erstellung, -änderung und Neubearbeitungen, es können aber auch Änderungen beim Probeneintrag vorkommen. In diesem Beispiel zeigt das Sequenz-Logbuch Änderungen an der Probenmenge für die Probenzeilen 2, 3 und 11. Diese Änderungen wurden am 09/12/02 um 16:29:48 gespeichert, wie in Abb. 34 auf Seite 91 zu sehen.



Description	Item	Comment	E-Sig	Timestamp	Source	Type	Host
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 11:37:38	Automation	Information	CERITYAQ
Sample completed.	---	---	None	09/12/02, 11:37:36	Automation	Information	CERITYAQ
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 11:37:26	Automation	Information	CERITYAQ
Sample completed.	---	---	None	09/12/02, 11:37:24	Automation	Information	CERITYAQ
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 11:37:13	Automation	Information	CERITYAQ
Sample completed.	---	---	None	09/12/02, 11:37:10	Automation	Information	CERITYAQ
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 11:36:24	Automation	Information	CERITYAQ
Sample completed.	---	---	None	09/12/02, 11:36:21	Automation	Information	CERITYAQ
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 11:36:11	Automation	Information	CERITYAQ
Test started by user 'User2'	---	---	None	09/12/02, 11:36:10	UserStamp	Information	CERITYAQ
Sequence started.	---	---	None	09/12/02, 11:36:09	Automation	Information	CERITYAQ
Sequence queued.	---	---	None	09/12/02, 11:36:09	Automation	Information	CERITYAQ
Sequence validated for correct input.	---	---	None	09/12/02, 11:36:08	Automation	Information	CERITYAQ
Sequence 'Demosequence1 ac-TestCase -Reprocessed ' reprocessing with method currently attached to the results, revision - 2	---	Updated	Signed	09/12/02, 16:38:43	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Sample Amount' from '28.3' to ' 43.76000'.	Sample line 3	Updated	None	09/12/02, 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Sample Amount' from '1' to ' 43.77000'.	Sample line 11	Updated	None	09/12/02, 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Sample Amount' from '1' to ' 28.30000'.	Sample line 3	Updated	None	09/12/02, 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Amount' from '0' to '0.01419'.	Sample line 2	Updated	None	09/12/02, 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Amount' from '0' to '0.02189'.	Sample line 2	Updated	None	09/12/02, 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Use' from '0' to '1'.	Sample line 2	Updated	None	09/12/02, 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Use' from '0' to '1'.	Sample line 2	Updated	None	09/12/02, 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
Sequence completed.	---	---	None	09/12/02, 11:09:50	Automation	Information	CERITYAQ
Sample completed.	---	---	None	09/12/02, 11:09:44	Automation	Information	CERITYAQ
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 11:09:32	Automation	Information	CERITYAQ
Sample completed.	---	---	None	09/12/02, 14:31:29	Automation	Information	CERITYAQ
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 14:31:20	Automation	Information	CERITYAQ

Abb. 34 Ausschnitt aus dem Proben-Logbuch, das Änderungen an der Menge dokumentiert

Mit diesen Änderungen an der Probenmenge ist die Dokumentation aller Änderungen für alle Sequenzversionen vollständig. Dies muss noch den verbleibenden offenen Sequenzversionen 3, 8 und 9 zugeordnet werden.

HINWEIS

Wenn alle PCs in dem Verbund synchronisiert gewesen wären, wäre eine direkte Zuordnung basierend auf den Zeitmarken möglich gewesen. Ohne Zeitsynchronisierung haben wir uns auf das Sequenz-Logbuch verlassen und die Eintragungen in der Reihenfolge des Eingangs auf Basis “first come, first served” geordnet. Dies bedeutet, dass die Einträge im Sequenz-Logbuch nicht nach der Zeitmarke, sondern nach der Reihenfolge des Eingangs sortiert sind.

Tabelle 7 gibt einen Überblick über alle Sequenzversionen sowie über ihre Änderungsabfolge und die Änderungsgründe.

Tabelle 7 Dokumentation der Sequenzversionen, einschließlich der Änderungen

Vers. Nr.	Datum	Zeitmarke (nicht synchronisiert)	Erlangter Status	erkannte Aktion	Versionsgrund	Erklärung
1	11-Sep	18:36:15	Ready for analysis, needs reprocessing (Fertig zur Analyse, Neubearbeitung erforderlich)	Acq completed (Akq. vollständig)	intern	Interne Version bei Sequenzübergabe
2		18:36:15	Acq completed, ready for print (Akq. vollständig, fertig zum Druck)	Acq completed, data analysis done (Akq. vollständig, Datenanalyse fertig)	Erste Ergebnisse	Datenakquisition abgeschlossen
3	12-Sep	14:53:15	Ready for analysis, needs reprocessing(Fertig zur Analyse, Neubearbeitung erforderlich)	One sample individually modified (Eine Probe einzeln geändert)	Ein geändertes Ergebnis in der Sequenz	Änderung bei der Probe Standard 1
4	12-Sep	15:25:36	Not complete, needs reprocessing (unvollständig, Neubearbeitung erforderlich)	Submission to reprocessing (Übergabe zur Neubearbeitung)	intern	Bezüglich Vers. 5 mit Neubearbeitung

Tabelle 7 Dokumentation der Sequenzversionen, einschließlich der Änderungen (fortsetzung)

Vers. Nr.	Datum	Zeitmarke (nicht synchronisiert)	Erlangter Status	erkannte Aktion	Versionsgrund	Erklärung
5	12-Sep	15:25:36	Ready for print (Fertig zum Druck)	Reprocessing executed (Neubearbeitung durchgeführt)	Neubearbeitung	Erste Neubearbeitung ausgeführt
6	12-Sep	17:07:54	Not complete, needs reprocessing (unvollständig, Neubearbeitung erforderlich)	Submission to reprocessing (Übergabe zur Neubearbeitung)	intern	Intern, da Neubearbeitung
7	12-Sep	17:07:54	Ready for print (Fertig zum Druck)	Reprocessing completed (Neubearbeitung abgeschlossen)	Aktualisierung der Sequenzergebnisse	Zweite Neubearbeitung ausgeführt
8	12-Sep	17:28:07	Not complete, needs reprocessing (unvollständig, Neubearbeitung erforderlich)	Modification of quantitation data (Änderung der Quantifizierungsdaten)	Änderung der Probenergebnisse	Änderung der Probenmenge
9	12-Sep	17:33:01	Not complete, needs reprocessing (unvollständig, Neubearbeitung erforderlich)	Reintegration of sample V2 (Reintegration der Probe V2)	Änderung der Probenergebnisse	Manuelle Integration der Probe V2
10	12-Sep	17:37:52	Not complete, needs reprocessing (unvollständig, Neubearbeitung erforderlich)	Submission to reprocessing (Übergabe zur Neubearbeitung)	intern	Intern, da Neubearbeitung
11	12-Sep	17:37:52	Ready for print (Fertig zum Druck)	Reprocessing completed (Neubearbeitung abgeschlossen)	Neubearbeitung	Dritte Neubearbeitung ausgeführt

Tabelle 7 Dokumentation der Sequenzversionen, einschließlich der Änderungen (fortsetzung)

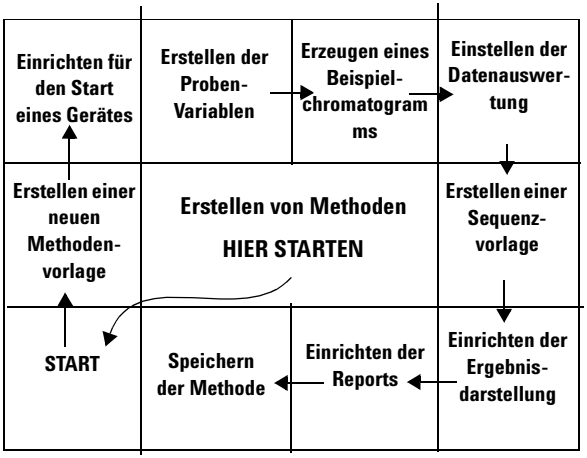
Vers. Nr.	Datum	Zeitmarke (nicht synchronisiert)	Erlangter Status	erkannte Aktion	Versionsgrund	Erklärung
12	12-Sep	20:44:16	Not complete, needs reprocessing (unvollständig, Neubearbeitung erforderlich)	Submission to reprocessing (Übergabe zur Neubearbeitung)	intern	Vierte Neubearbeitung ausgeführt
13	12-Sep	20:44:16	Ready for print (Fertig zum Druck)	Reprocessing completed (Überarbeitung abgeschlossen)	Neubearbeitung	
14	18-Sep		Not complete, needs reprocessing (unvollständig, Neubearbeitung erforderlich)	Submission to reprocessing(Übergabe zur Neubearbeitung)	intern	Fünfte Neubearbeitung ausgeführt
15	18-Sep		Current revision, ready for print (Aktuelle Version, fertig zum Druck)	None, current revision (Keine. Aktuelle Version)	keiner	Keine

4 Methodenerstellung

Cerity für die pharmazeutische QA/QC - Methodenkonzepte 97
Cerity für die pharmazeutische QA/QC - Methodenabschnitte 102
Calibration (Kalibrierung) 108
Custom calculations (Benutzerdefinierte Berechnungen) 115
Layout der Datenüberprüfung 132
Reporterstellung 135

Hier lernen Sie die Konzepte kennen, die Ihnen das Erstellen von Methoden erleichtern. Dieses Kapitel hilft Ihnen bei der Durchführung der Übungen des Teils Erstellen von Methoden im Leitfaden *Übungen für Anwender*.

Das folgende Ablaufschema zeigt dem erfahrenen Benutzer bzw. dem Administrator den Weg zum Erstellen einer Methode. Beginnen Sie bei **START**.



Jedes Thema in diesem Kapitel bietet Ihnen Hintergrundinformationen, mit denen Sie diesen Ablauf Schritt für Schritt nachvollziehen können.

Cerity für die pharmazeutische QA/QC - Methodenkonzepte

Sie beginnen mit der Erstellung einer Master Method (Basismethode), indem Sie in der Standardsymbolleiste aus der Liste **New** den Punkt **Method** wählen.

Master methods (Basismethoden)

Eine *Basismethode* ist eine Methode, die nur von zugewiesenen Benutzern geändert werden kann. Alle Benutzer können eine Basismethode benutzen.

Wenn Sie soweit sind, dass Sie anderen Benutzern eine Änderung der *Basismethode* erlauben möchten, können Sie die aktuelle Version freigeben. Wenn der Administrator das Auditing für die Aufgabe "Release a method" (Freigabe einer Methode) eingeschaltet hat, müssen Sie Ihren Benutzernamen und das Passwort zur Freigabe der Methode eingeben.

Nachdem Sie die Basismethode freigegeben haben, kann jeder mit der Berechtigung zum Ändern von Methoden diese Version ändern. Wenn Sie die Basismethode ändern, bleibt die neue Version solange nicht freigegeben, bis Sie sie wieder freigeben.

Instrument methods (Gerätemethoden)

Eine *Gerätemethode* ist eine freigegebene Basismethode, die einem neuen Gerät zugewiesen worden ist. Jeder Benutzer kann eine Gerätemethode benutzen oder ändern.

Nachdem Sie eine Basismethode freigegeben haben, können Sie sie einem anderen Gerät mit Hilfe des **Method Wizard** (Methodenassistent) zuweisen. Um die Methode zuzuweisen, müssen Sie eine *Gerätemethode* mit der freigegebenen Methode als Vorlage erstellen. Jeder Benutzer, für den vom Cerity NDS

Administrator die entsprechenden Rechte eingerichtet wurden, kann daraufhin die Originaleinstellungen in der Methodenansicht ändern.

Wenn das Gerät, dem Sie die Methode zuweisen,unterschiedlich zur Originalmethode konfiguriert ist, müssen Sie die Geräte-parameter in der Methodenansicht ändern.

Sie beginnen die Erstellung einer Gerätemethode, indem Sie aus der Liste **New** in der Standardsymbolleiste den Punkt **Instrument Method** wählen.

Weitere Informationen zum Methodenassistenten und zur Methodenansicht finden Sie unter "Method View (Methodenansicht)" auf Seite 25 und "Method Setup (Methodenerstellung)" auf Seite 44.

Methoden für Einzelproben oder Sequenzen

Cerity für die pharmazeutische QA/QC gibt Ihnen die Möglichkeit, Methoden für Einzelproben und Methoden für Sequenzen zu erstellen. Daher wird für alle Proben einer Sequenz nur eine Methode verwendet.

Zwischen einer Methode für Einzelproben und einer Methode für Sequenzen gibt es mehrere Unterschiede:

- Die Methode für Sequenzen enthält eine Tabelle, mit der Sie eine Sequenzvorlage erstellen, die häufiger gebraucht wird.
- Die Methode für Sequenzen ordnet Proben und Standards zum Zweck benutzerdefinierter Berechnungen und Reports in Gruppen an, z.B. QC-Probengruppe, Kalibrierstandardsgruppe, Probengruppe und Kundenprobengruppe.
- Für Sequenzen können Sie Rauschpegelberechnungen hinzufügen, nicht jedoch für Einzelproben.
- Für Sequenzen können Sie die Reihenfolge der Kalibrierung und den Kalibriervorgang auswählen.

Den Einträgen und Ergebnissen zugeordnete Methoden

Wenn Sie eine Einzelprobe eintragen oder eine neue Sequenz erstellen, wählen Sie die Methode zur Bearbeitung dieser Probe oder der Sequenz aus. Die Angaben und Anweisungen innerhalb der Methode bleiben während der gesamten Analyse und in den Ergebnissen mit der Probe bzw. Sequenz verbunden.

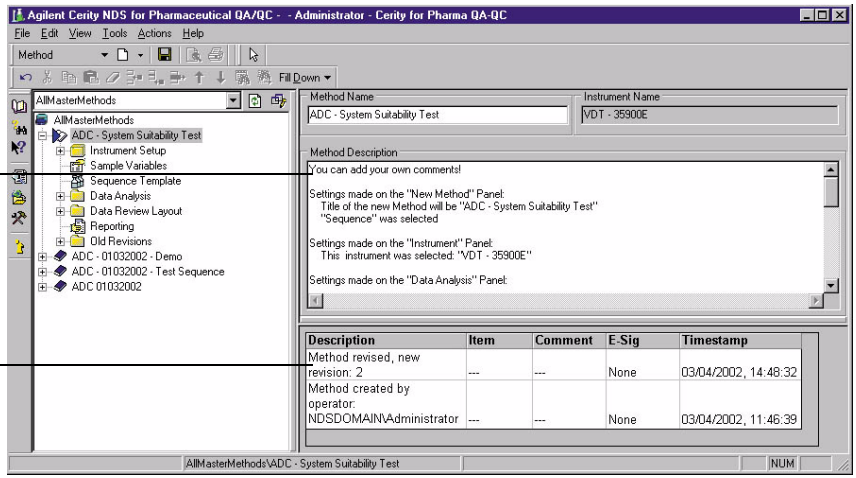
Das bedeutet, dass bei der Änderung des Wertes eines Probeneintrags oder einer Integrationseinstellung und anschließender erneuter Auswertung die Berechnungen mit jener Methodenversion erfolgen, die ursprünglich dem Ergebnis zugeordnet war. Wenn Sie die Methode ändern oder eine andere Methode zur Neuauswertung der Ergebnisse verwenden möchten, müssen Sie zunächst die aktuelle Version oder die neue Methode dem Ergebnis zuordnen.

Methodeneinträge und Änderungen

Methodeneinträge und Änderungen werden in der Abbildung unten beschrieben.

Method Description (Methodenbeschreibung) – Die im Method Wizard ausgewählten Optionen werden im Arbeitsbereich Method Description angezeigt.

Method Logbook (Methodenlogbuch) – Die Einträge und Änderungen an der Methode werden im Methodenlogbuch angezeigt.



Methodenversionen

Wenn Sie eine Methodenvorlage mit dem Method Wizard (Methodenassistenten) erstellen und speichern, erstellen Sie die Version 1 der Methode. Bei jeder nachfolgenden Änderung und Speicherung der Methode wird eine neue Version erstellt. Wenn Sie eine Basismethode freigeben, wird ebenfalls eine neue Version erstellt.

Wenn Sie in einem bestimmten Methodenordner eine Version aus dem Versionsordner OLD wählen, erscheint im Arbeitsbereich die **Method Description** (Methodenbeschreibung) und das **Method Logbook** (Methodenlogbuch).

Was Sie mit den Methoden von Cerity für die pharmazeutische QA/QC machen können

Mit Hilfe der Methoden von Cerity für pharmazeutische QA/QC können Sie:

- Eine Methode einem Gerät zur Gerätesteuerung zuordnen.
- Ihre eigenen Multiplikatoren und Divisoren verwenden, um die Konzentration für eine Probe zu berechnen.
- Ihre eigenen benutzerdefinierten Probenvariablen für die eigene Berechnung und Berichterstattung verwenden.
- Eine Sequenztabelle als Vorlage für alle ähnlichen oder wiederkehrenden Sequenzen verwenden.
- Ein Musterchromatogramm zur Erleichterung der Peakintegration und –identifikation verwenden.
- Ganze Flächen des Chromatogramms zusammenfassen.
- Unterschiedliche Substanzmengen für jede Probe bei einer einstufigen oder mehrstufigen Kalibrierung eintragen.
- Proben in einer Sequenz mit dem Standard vor der Probe, den Standards vor und nach der Probe oder mit allen Standards der Sequenz quantifizieren.
- Eine Probe mit einer Methode, die bereits Responsefaktoren enthält, analysieren oder Sequenzen bearbeiten, deren Probenquantifizierung mit den Kalibrierstandards der Sequenz erneuert wird.
- Nicht kalibrierte Substanzen und nicht identifizierte Peaks mittels Responsefaktoren von kalibrierten Substanzen quantifizieren.
- Ihre eigenen Variablen und Formeln zur Berechnung der Ergebnisgruppenstatistik oder für andere im Labor erforderliche Berechnungen verwenden.
- Hinweise und Warnungen des Typs “Entspricht/entspricht nicht” anzeigen, wenn Variablen und Berechnungen nicht innerhalb der vorgegebenen Grenzen liegen.
- Jedes verfügbare Feld bzw. jede verfügbare Variable oder Berechnung in der Ergebnisdarstellung und im Report sehen.
- Bereits vorhandene Systemeignungsvariablen zur Prüfung der Leistung verwenden.
- Vordefinierte Reporttypen mit zugehörigen Vorlagen verwenden, die Sie ändern oder neu erstellen können, um die benötigten Reports zu erzeugen.

Cerity für die pharmazeutische QA/QC - Methodenabschnitte

Eine Methode von Cerity für die pharmazeutische QA/QC enthält alle erforderlichen Parameter zur Gerätesteuerung, Datenerfassung, Datenanalyse und Auswertung. Darüber hinaus enthält die Methode Ihre benutzerdefinierten Probenvariablen und Vorlagen für Sequenzen (Sequenzvorlagen), Ergebnisprüfung (Layout der Datenüberprüfung) und Reports (Reportvorlage).

Mit dem **Method Wizard** (Methodenassistenten) können Sie die Abschnitte und Optionen auswählen, die in der Methodenvorlage der Methodenansicht angezeigt werden sollen. Alle Abschnitte, die in der Methodenansicht angezeigt werden können, werden im Folgenden beschrieben.

Instrument setup (Geräteeinstellung)

In diesem Abschnitt erfolgt die Eingabe von Parametern für konfigurierte Geräte.

Eine *Equilibriermethode* ist eine Methode mit Geräteparametern, die nur zur Säulenequilibrierung und Basislinienstabilisierung dienen.

Sie können eine Equilibriermethode einrichten, um das Gerät und die Säule vor der Anlayse zu equilibrieren oder um die Säule nach einer Sequenz auf die nächste Sequenz vorzubereiten. Stellen Sie sicher, dass das Injektionsvolumen des automatischen Probengebers auf Null gesetzt ist.

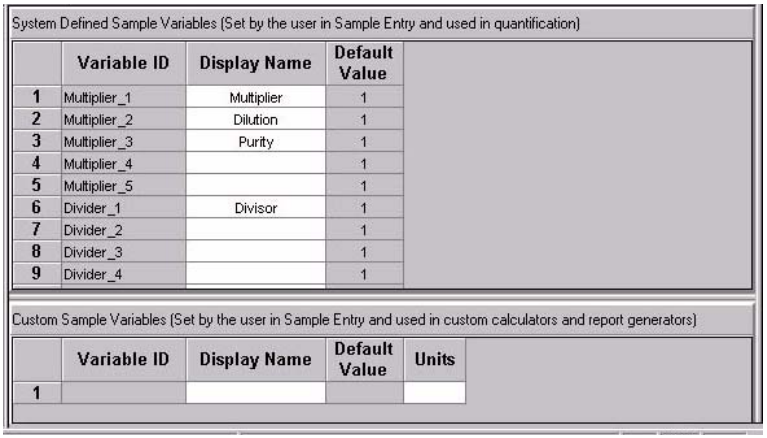
Sample variable (Probenvariablen)

Probenvariablen sind Faktoren und Variablendefinitionen, die für Quantifizierungen, eigene Berechnungen und Reports benötigt werden.

System-Probenvariablen

Die Anwendung für die pharmazeutische QA/QC bietet Multiplikatoren und Divisoren als Variablen für die Quantifizierung an. Durch Zuordnung eines Überschriftennamens werden die Variablen aktiviert.

Wenn Sie eine Methode zuordnen, die diese Variablen für eine Probe oder Sequenz verwendet, erscheinen die Variablen mit ihren Standardwerten in der Registerkarte **Amounts** des Fensters **Sample Entry**. Sie können den Wert dieser Variablen für jede Probe vor dem Analysenlauf ändern.



System Defined Sample Variables (Set by the user in Sample Entry and used in quantification)

	Variable ID	Display Name	Default Value
1	Multiplier_1	Multiplier	1
2	Multiplier_2	Dilution	1
3	Multiplier_3	Purity	1
4	Multiplier_4		1
5	Multiplier_5		1
6	Divider_1	Divisor	1
7	Divider_2		1
8	Divider_3		1
9	Divider_4		1

Custom Sample Variables (Set by the user in Sample Entry and used in custom calculators and report generators)

	Variable ID	Display Name	Default Value	Units
1				

Custom sample variables (Benutzerdefinierte Probenvariablen)

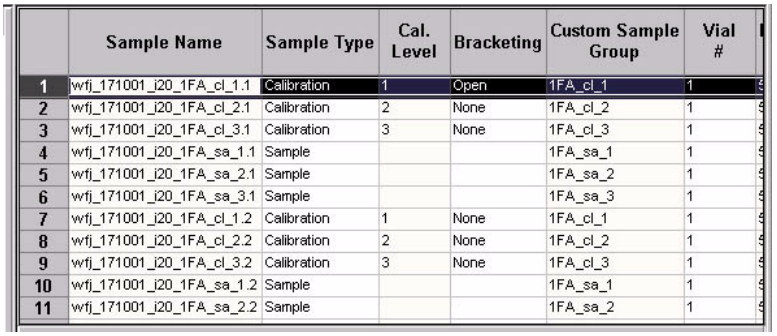
Sie können eine eigene Gruppe von Variablen als Multiplikatoren oder Divisoren für benutzerdefinierte Berechnungen und Reports verwenden. Dabei können Sie Überschriftennamen, Standardwerte und Kommentare eintragen, die in Tabellen des Probenreports erscheinen.

Sequence Template (Sequenzvorlage)

Eine ***Sequenzvorlage*** ermöglicht Ihnen die Vorgabe der Reihenfolge und Anzahl an Kalibrierstandards und unbekannten Proben in einer Sequenztabelle.

Die Sequenzvorlage erscheint in der Sample View (Probenansicht) als Sequenztabelle, nachdem Sie für die Methode, die diese Vorlage benutzt, eine Sequenz erstellt haben. Sie können die Sequenzen ohne jede Änderung an der Tabelle basierend auf der Vorlage zur Analyse einplanen.

Wenn Sie Kalibrierstandards in eine Sequenzvorlage eintragen möchten, müssen Sie zuvor die Kalibriereinstellungen im Teil Data Analysis abschließen.



	Sample Name	Sample Type	Cal. Level	Bracketing	Custom Sample Group	Vial #
1	wfj_171001_i20_1FA_cl_1.1	Calibration	1	Open	1FA_cl_1	1
2	wfj_171001_i20_1FA_cl_2.1	Calibration	2	None	1FA_cl_2	1
3	wfj_171001_i20_1FA_cl_3.1	Calibration	3	None	1FA_cl_3	1
4	wfj_171001_i20_1FA_sa_1.1	Sample			1FA_sa_1	1
5	wfj_171001_i20_1FA_sa_2.1	Sample			1FA_sa_2	1
6	wfj_171001_i20_1FA_sa_3.1	Sample			1FA_sa_3	1
7	wfj_171001_i20_1FA_cl_1.2	Calibration	1	None	1FA_cl_1	1
8	wfj_171001_i20_1FA_cl_2.2	Calibration	2	None	1FA_cl_2	1
9	wfj_171001_i20_1FA_cl_3.2	Calibration	3	None	1FA_cl_3	1
10	wfj_171001_i20_1FA_sa_1.2	Sample			1FA_sa_1	1
11	wfj_171001_i20_1FA_sa_2.2	Sample			1FA_sa_2	1

Example chromatogram (Beispielchromatogramm)

Ein *Beispielchromatogramm* ist jedes Chromatogramm einer Einzelinjektion, das Sie zur Einstellung der Integration und Identifikation verwenden.

Sie sollten zunächst ein *Beispielchromatogramm* erzeugen, bevor Sie die Analyseparameter der Methode erstellen. Mit dem Beispielchromatogramm können Sie Ihre Integrationsparameter, die Ereignisse und die zu identifizierenden Substanzen testen. Mit diesem Chromatogramm können Sie auch die Ergebnisse anderer Proben vergleichen.

Anleitungen zum Erzeugen eines anfänglichen Beispiel-Chromatogramms finden Sie in der Online-Hilfe unter "Erzeugen eines Beispielchromatogramms".

Wählen Sie ein Chromatogramm aus der Datenbank aus oder analysieren Sie eine Probe, um ein Beispielchromatogramm zu erzeugen. Hierzu benötigen Sie nur ein Methodengerüst (nur Geräteparameter). Sie müssen kein Beispielchromatogramm auswählen, um die Datenanalyse einzurichten.

Integration

Initial and timed events (anfängliche und zeitgesteuerte Ereignisse)

Sie können anfängliche und zeitgesteuerte Integrationsereignisse sowohl für ein einzelnes Signal als auch für alle Signale eines Detektors erstellen.

Werkzeuge für die Integration eines Chromatogramms

In diesem Abschnitt der Methode können Sie die Integrationseinstellungen der Methode ändern, wenn Ihnen die Standardintegration des Beispielchromatogramms nicht passend erscheint.

- Integrate (Integrieren) – Mit Hilfe der Schaltfläche Integrate können Sie das Beispielchromatogramm nach einer Änderung der Ereignisse integrieren.

- Autointegrate (Automatisches Integrieren) – Diese Funktion berechnet die Standardeinstellungen aus dem Chromatogramm.

Compound identification (Substanzidentifizierung)

Auswahl zwischen Hinzufügen oder Entfernen der Identifizierung

Sie können mit der Symbolleiste oder den Kontextmenüs sowohl im Chromatogramm als auch in der Substanztabelle Identifikationen hinzufügen oder entfernen. Wenn alle Peaks als Substanzen identifiziert werden sollen, benutzen Sie am einfachsten die Schaltfläche AddTimes of Signal (Signalzeiten hinzufügen).

Das Technische Referenz*-handbuch enthält weitere Einzelheiten zum Integrationsalgorithmus und zu den Verfahren zur Substanzidentifizierung von Cerity für die pharmazeutische QA/QC.*

Peak summing (Peaksummierung)

Die Peaksummierung können Sie nur dann einrichten, wenn Sie im **Method Wizard** (Methodenassistenten) die Option **Peak Summing** aktiviert haben. Sie können interaktiv eine Fläche im Chromatogramm für die Peaksummierung eingrenzen.

Calibration (Kalibrierung)

Die Anwendung für pharmazeutische QA/QC bietet viele Möglichkeiten zur Einrichtung der Kalibrierung. Zwei davon heben die Kalibrierung der Certity für pharmazeutische QA/QC von anderen Programmen ab:

- Sie können für jede Probe die Mengen der Kalibrierstandards eintragen.
- Sie können eine Kalibrierung mit den in der Methode gespeicherten Responsefaktoren einrichten und die Kalibrierstandards nur für eine gelegentliche Bestätigung der Kalibrierung verwenden. Sie können die Kalibrierung auch so einrichten, dass Sie häufiger mit den in der Sequenz eingetragenen Kalibrierstandards kalibrieren müssen.

Weitere Informationen zu diesem Thema finden Sie im Abschnitt "Calibration (Kalibrierung)" auf Seite 108.

Quantitation (Quantifizierung)

Eine *Compound group (Substanzgruppe)* ist eine Gruppe von kalibrierten oder nicht kalibrierten Substanzen, für die Sie selber Berechnungen und Grenzwerte einrichten.

Identifizierte Substanzen, die Sie aus der Kalibriertabelle entfernen, erscheinen im Arbeitsbereich Quantitation als nicht kalibrierte Substanzen. Sie können sowohl für kalibrierte als auch für nicht kalibrierte Substanzen einen Responsefaktor auf Basis des Responsefaktors einer kalibrierten Substanz festlegen. Sie können auch *Substanzgruppen* für kalibrierte und nicht kalibrierte Substanzen festlegen.

Custom Calculations (Benutzerdefinierte Berechnungen)

Bei der Anwendung für die pharmazeutische QA/QC können Sie zusätzliche Berechnungen und Bedingungen einführen, die sich auf die Daten der Quantifizierung beziehen. Diese benutzerdefinierten Berechnungen können für weitere Berechnungen verwendet werden und in der Ergebnisansicht angezeigt und in Reports gedruckt werden. Sie werden in der Datenbank zusammen mit den von der Software automatisch erstellten Ergebnissen gespeichert.

Weitere Informationen zu diesem Thema finden Sie im Abschnitt "Custom calculations (Benutzerdefinierte Berechnungen)" auf Seite 115.

Limits (Grenzwerte)

Sie können für folgende Ergebnisarten Grenzwerte festlegen:

- Einzelne Injektionen
- Zusammenfassung mehrerer Injektionen
- Probentypgruppen – nur für Sequenzen

Verfügbar sind dabei jene Variablen und Berechnungen, die im Arbeitsbereich Custom Calculations für den jeweiligen Ergebnistyp verfügbar waren bzw. die Sie dort eingerichtet haben. Innerhalb jeder Ergebnisart können Sie Grenzwerte für unterschiedliche Probengruppen einrichten und diese Grenzwerte entweder auf alle Substanzen oder nur auf die im Zuge der Quantifizierung erstellten Substanzgruppen anwenden.

Die Ergebnisse aller Grenzwertprüfungen für ein und dieselbe Position werden zu einem Ergebnis zusammengefasst.

HINWEIS Sie können zum Beispiel Grenzwerte für Phthalate einrichten, die in den Ergebnissen der Einzelinjektionen der Kalibrierstandards erscheinen. Hierzu erstellen Sie eine Substanzgruppe namens Phthalate in der Quantifizierung und ordnen sowohl die kalibrierten als auch die nicht kalibrierten Phthalate der Gruppe zu.

Data Review Layout (Aussehen der Datenüberprüfung)

Weitere Informationen zu diesem Thema finden Sie im Abschnitt "Layout der Datenüberprüfung" auf Seite 132.

Die Ergebnistabelle und die zusammenfassenden Werte werden in der Ergebnisüberprüfung (Ergebnisansicht) gemäß Ihrer Auswahl im Data Review Layout dargestellt.

Reporting (Reporterstellung)

Weitere Informationen zu diesem Thema finden Sie im Abschnitt "Reporterstellung" auf Seite 135.

Konfigurieren Sie die Reporterstellung in der Methode. Sie können dann einige Methodeneinstellungen für jede Einzelprobe oder für eine Sequenz ändern. Die Reports werden automatisch mit der Bearbeitung der Probe oder Sequenz erstellt und können auch bei der Neuauswertung neu erstellt werden.

Calibration (Kalibrierung)

Auswahlmöglichkeiten bei der Kalibrierung in Cerity für pharmazeutische QA/QC

Die Kalibrierung ermittelt den Responsefaktor mittels Kalibrierstandards zur Berechnung der absoluten Substanzkonzentration in den Proben.

Ein *Kalibrierstandard* ist eine Probe mit einer bekannten Menge der zu quantifizierenden Substanz.

Ein *Responsefaktor* ist ein Wert, der sich entweder aus der Division des Responsewerts durch die Substanzmenge oder aus der Division der Menge durch den Responsewert ergibt. Oder er wird aus der Kalibrierkurve berechnet.

Eine *einstufige Kalibrierung* verwendet nur eine einzige Standardkonzentration für die Kalibrierkurve. Die Kalibrierkurve zeigt eine gerade Linie mit zwei Punkten: der einzelnen Standardkonzentration gegenüber dem Responsepunkt und den Nullpunkt.

Eine *mehrstufige Kalibrierung* verwendet mehrere Konzentrationen der Standardlösung, und Sie können für die Datenpunkte den passenden Kurventyp wählen.

Die Optionen für die Kalibrierung in Cerity für die pharmazeutische QA/QC wählen Sie größtenteils im **Method Wizard** (Methodenassistenten) aus. Nachdem Sie den Methodenassistenten beendet und den Abschnitt Kalibrierungen gespeichert haben, können Sie diese nicht mehr ändern. Sie müssen eine neue Methode mit neuen Angaben erstellen.

Compound calibration table (Substanz-Kalibriertabelle)

Sie können eine neue Kalibriertabelle erstellen, eine Kalibriertabelle von einer kopierten Methode übernehmen oder eine manuelle Kalibrierung einrichten.

Kalibrierarten

Sie können im Methodenassistenten sowohl für einzelne Proben als auch für Sequenzen eine Kalibrierung mit folgenden Optionen einrichten:

- Feste oder variable Menge für die einstufige Kalibrierung
- Feste oder variable Menge für die mehrstufige Kalibrierung
- Manuelle Kalibrierung

Wenn Sie im Methodenassistenten die Option **Variable Amounts** (variable Mengen) auswählen, können Sie eine neue Menge eingeben, wenn Sie in der Probenansicht eine Probe oder Sequenz eintragen. Wenn Sie im Methodenassistenten **Fixed Amounts** (feste Mengen) auswählen, müssen Sie in der Methodenansicht die Mengen für jede Substanz unter Calibration eintragen. Sie können keine neue Menge eingeben, wenn Sie eine Probe in der Probenansicht eintragen.

Recalibration and order of quantitation (Nachkalibierung und Reihenfolge der Quantifizierung)

Für Sequenzen können Sie den Typ der Nachkalibrierung und die Reihenfolge der Probenquantifizierung mit den Kalibrierstandards festlegen:

- **Single update calibration (Einfache Aktualisierung der Kalibrierung)** – Eine Anzahl Proben wird basierend auf dem Kalibrierstandard oder dem Mittelwert der Kalibrierstandards vor den Proben quantifiziert.
- **Overall calibration (Gesamtkalibrierung) –** Die Kalibrierstandards werden analysiert und der Mittelwert gebildet, bevor die Proben quantifiziert werden (Klammerbildung des Typs ”Mittelwert der Mittelwerte”).
- **Bracketing (Klammerbildung) –** Eine Anzahl Proben wird basierend auf dem Mittelwert der Kalibrierstandards vor und nach den Proben quantifiziert.

Single update calibration (einfache Aktualisierung der Kalibrierung)

Bei einer einfachen Aktualisierung der Kalibrierung wird die Kalibriertabelle nach jedem Kalibrierstandard aktualisiert. Die aktualisierte Kalibriertabelle wird zur Quantifizierung nachfolgender Proben bis zum nächsten Kalibrierstandard verwendet. Die Reihenfolge der Abläufe wird in Abb. 35 veranschaulicht.

Die Kalibriertabelle kann mit Retentionszeiten und Responsefaktoren mit Hilfe der Option **Replace** bei der Kalibrierung initialisiert werden. Diese Option wird normalerweise am Anfang der Sequenz einer HPLC-Analyse eingesetzt.

Um eine laufende Mittelwertbildung der Retentionszeiten und/oder Responsefaktoren der Kalibrierstandards zu erhalten, muss die Option **Average** (Mittelwert) bei der Kalibrierung verwendet werden. Diese Option wird vor allem dann eingesetzt, wenn die Kalibrierdaten ersetzt wurden.

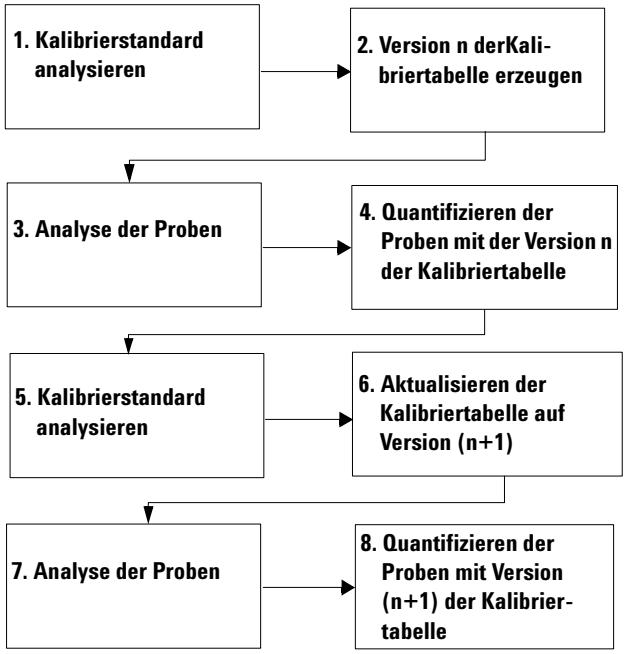

1. Kalibrierstandard analysieren
2. Version n derKali-briertabelle erzeugen
3. Analyse der Proben
4. Quantifizieren der Proben mit der Version n der Kalibriertabelle
5. Kalibrierstandard analysieren
6. Aktualisieren der Kalibriertabelle auf Version (n+1)
7. Analyse der Proben
8. Quantifizieren der Proben mit Version (n+1) der Kalibrier-tabelle

Abb. 35 Schema zur Aktualisierung einer einstufigen Kalibrierung

Bracketing (Klammerbildung)

Bei der Klammerkalibrierung wird die Kalibriertabelle mit zwei Läufen der Kalibrierungsstandards aktualisiert, einem vor und einem nach der Probe. Die Proben werden erst dann quantifiziert, wenn der zweite Lauf der Kalibrierstandards erfolgt ist. Die Reihenfolge der Abläufe wird in Abb. 36 veranschaulicht.

Die Responsefaktoren werden zu Beginn der Klammerbildung gebildet und mit den am Ende der Klammer ermittelten Kalibrierwerten gemittelt. Die Retentionszeiten werden genau gleich wie bei einer einstufigen Aktualisierung der Kalibrierung behandelt.

Bei der Auswertung von Injektionen zur Systemeignung bietet das System die Möglichkeit, eine anfängliche einfache Kalibrieraktualisierung an den Anfang der Sequenz, vor der Klammerkalibrierung, einzufügen.

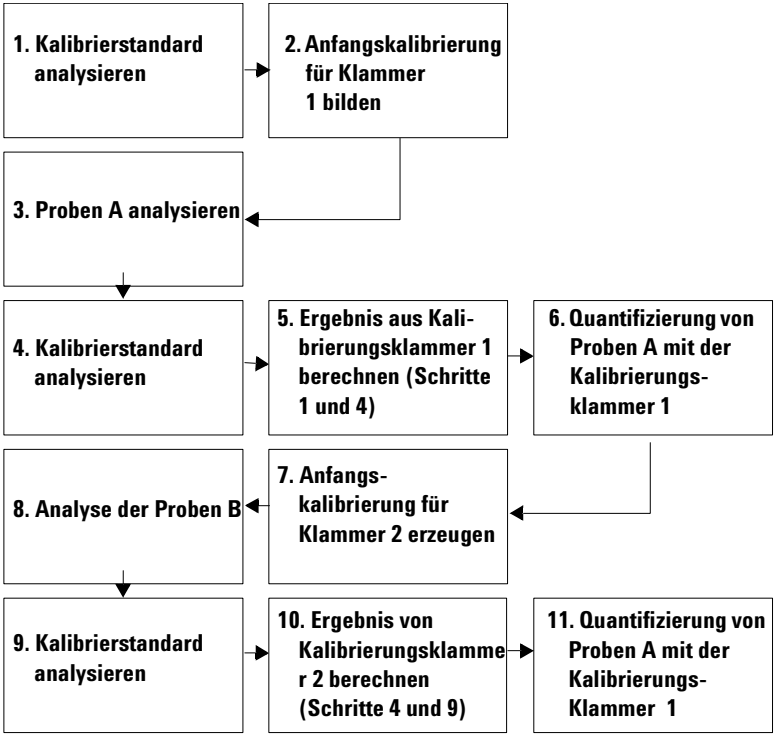

1. Kalibrierstandard analysieren
2. Anfangskalibrierung für Klammer 1 bilden
3. Proben A analysieren
4. Kalibrierstandard analysieren
5. Ergebnis aus Kalibrierungsklammer 1 berechnen (Schritte 1 und 4)
6. Quantifizierung von Proben A mit der Kalibrierungsklammer 1
7. Anfangskalibrierung für Klammer 2 erzeugen
8. Analyse der Proben B
9. Kalibrierstandard analysieren
10. Ergebnis von Kalibrierungsklammer 2 berechnen (Schritte 4 und 9)
11. Quantifizierung von Proben A mit der Kalibrierungs-Klammer 1

Abb. 36 Schema zur Klammerkalibrierung

Overall Bracketing (Gesamtklammerbildung)

Bei der Gesamtklammerkalibrierung wird die Kalibriertabelle beim Start der Sequenz initialisiert. Die Ergebnisse des ersten Standardsatzes in der Sequenz ersetzen die bestehenden Kalibrierwerte. Alle Kalibrierstandards in der Sequenz werden dann zum Erstellen einer Kalibriertabelle am Ende der Sequenz verwendet. Mit dieser werden dann alle Proben quantifiziert. Die Reihenfolge der Abläufe wird in Abb. 37 veranschaulicht.

Die Responsefaktoren werden zu Beginn der Sequenz durch die Werte des ersten Kalibrierstandards ersetzt und mit den im Zuge der Sequenz erhaltenen Kalibrierwerten gemittelt. Die Retentionszeiten werden genauso behandelt wie bei einer einstufigen Aktualisierung der Kalibrierung.

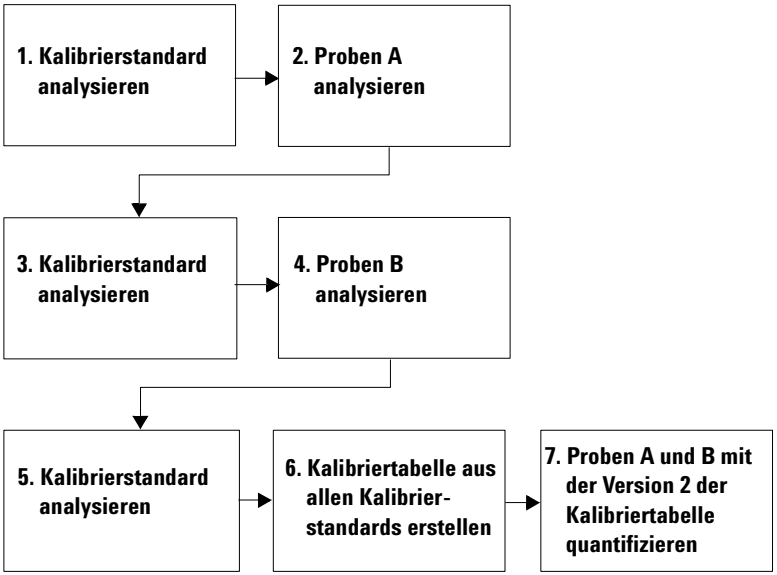

1. Kalibrierstandard analysieren
2. Proben A analysieren
3. Kalibrierstandard analysieren
4. Proben B analysieren
5. Kalibrierstandard analysieren
6. Kalibriertabelle aus allen Kalibrier-standards erstellen
7. Proben A und B mit der Version 2 der Kalibriertabelle quantifizieren

Abb. 37 Schema zur Aktualisierung einer Gesamtklammerkalibrierung

Calibration procedures (Kalibrierverfahren)

Bei Sequenzen können Sie zwischen zwei Kalibrierverfahren wählen:

- gerätespezifische Kalibrierung
- sequenzspezifische Kalibrierung

Instrument-specific calibration (gerätespezifische Kalibrierung)

Diese Art von Kalibrierverfahren kalibriert die Geräte für eine spezielle Analyse. Dieses Verfahren können Sie verwenden, wenn die Kalibrierung über einen langen Zeitraum stabil ist. Wenn Sie die Kalibrierstandards mit der Methode starten, werden die Responsefaktoren und die Kalibrierkurven mit der Methode gespeichert. Alle Proben, die diese Methode benutzen, werden dann mit den Responsefaktoren der Methode quantifiziert. Sie können die Kalibrierung mit neuen Kalibrierstandards aktualisieren. Verwenden Sie dieses Verfahren primär in der GC-Analytik. Analysieren Sie mit dieser Verfahrensart einzelne Proben.

Sequence-specific calibration (sequenzspezifische Kalibrierung)

Dieser Kalibriervorgang kalibriert das Gerät nur für die aktuelle Sequenz. Dieses Verfahren sollten Sie dann verwenden, wenn die Kalibrierung nur für einen kurzen Zeitraum stabil ist. Responsefaktoren werden nicht mit der Methode gespeichert. Sie werden jedesmal aktualisiert, wenn Sie eine Sequenz mit Kalibrierstandards für eine Methode analysieren. Verwenden Sie dieses Verfahren primär in der LC-Analytik.

Custom calculations (Benutzerdefinierte Berechnungen)

Auf die benutzerdefinierten Berechnungen in Cerity für die pharmazeutische QA/QC greifen Sie über eine vertraute, tabellenblattähnliche Schnittstelle ähnlich Microsoft® Excel zu. Die Anzahl und Art der Tabellenblätter, die Sie für Berechnungen einrichten können, hängt vom Methodentyp - Einzelprobe oder Sequenz - und dem Ergebnistyp ab. Die in der Datenbank verfügbaren Variablen hängen ebenfalls vom Ergebnistyp ab.

Verfügbare Ergebnistypen für benutzerdefinierte Berechnungen

Ein *Ergebnistyp* ist eine Ergebniskategorie basierend auf einer Injektion, einer Gruppe von Proben oder Standards oder einer Sequenz.

Für einzelne Proben können benutzerdefinierte Berechnungen für einzelne Injektionsergebnisse und für Zusammenfassungen mehrerer Injektionen erstellt werden. Sie können Methodenvariablen, einschließlich benutzerdefinierter Probenvariablen aus der Methode, sowie Substanz und Ergebnisse der Peakquantifizierung für die Berechnung verwenden.

Eine *Probentypgruppe* ist eine Reihe von Sequenzergebnissen, die nach Probentyp gruppiert sind, wie z B. Kalibrierstandards, QC-Probe oder Probengruppen. Sie können auch eigene Probengruppen definieren.

Für Sequenzen können benutzerdefinierte Berechnungen für einzelne Injektionsergebnisse, Zusammenfassungen mehrfacher Injektionen und für *Probentypgruppen* erstellt werden.

Vorgehen zum Erstellen benutzerdefinierter Berechnungen

Beim Erstellen benutzerdefinierter Berechnungen fügen Sie einem Arbeitsblatt Spalten für in der Datenbank vorhandene Felder, Variablen und Ergebnisse hinzu, anschließend fügen Sie neue Spalten mit den Formeln zur Berechnung der neu definierten Variablen hinzu.

Es stehen eine Vielzahl mathematischer Operatoren und bedingter Anweisungen zur Bearbeitung dieser Variablen zur Verfügung. Die Syntax zur Verbindung der Variablen mit den Funktionen entspricht im Wesentlichen der von Microsoft Excel. Die Online-Hilfe enthält Beschreibungen zu den verfügbaren Variablen.

Wenn Sie später noch Substanzen zur Methode hinzufügen, müssen Sie das Arbeitsblatt mit den beneutzerdefinierten Berechnungen überarbeiten, damit die Ergebnisse für die neue Substanz berechnet werden.

Ablauf der benutzerdefinierten Berechnung

Zum besseren Verständnis des Ablaufes sehen Sie sich am besten an, wie die Ergebnisse der benutzerdefinierten Berechnung erzeugt werden. Wie Sie in dieser Abbildung sehen, verwendet das System die Ergebnisse der einzelnen benutzerdefinierten Berechnungen, um die zusammenfassenden Ergebnisse einer Mehrfachinjektion zu berechnen. Diese wiederum können zur Berechnung von Probentypgruppenergebnissen verwendet werden. Es werden alle Ergebnisse in der Datenbank gespeichert und der Datenbank entnommen.

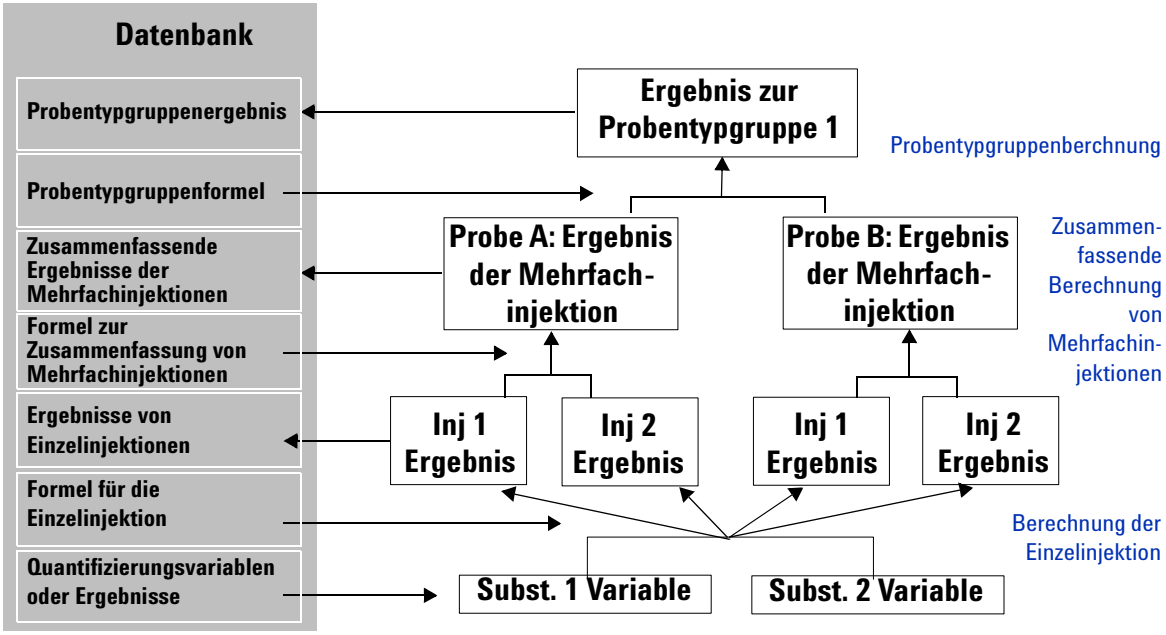
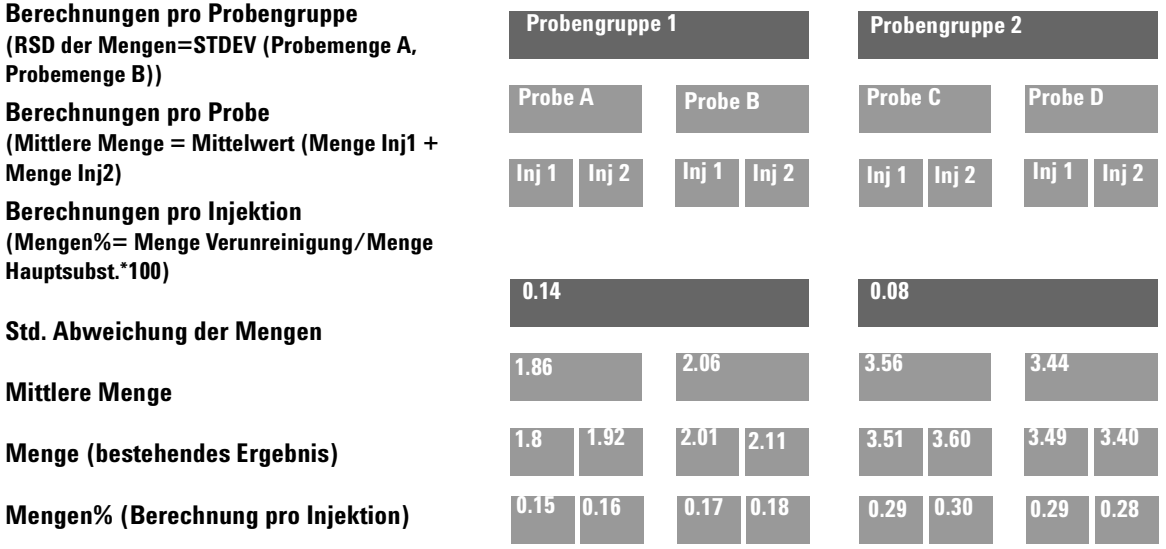


Abb. 38 Hierarchie der erstellten Berechnungen

Beispiel einer Berechnung



Einrichtung des Berechnungsarbeitsblattes

Sie erstellen benutzerdefinierte Berechnungen über eine vertraute, tabellenblattähnliche Schnittstelle, ähnlich Microsoft Excel. Mit diesen Arbeitsblättern erstellen und führen Sie die Berechnungen für den Ergebnistyp für jede Stufe der Berechnung durch.

- Mit dem Arbeitsblatt für die Einzelinjektion, das nach der Quantifizierung ausgeführt wird, können Sie für alle Probentypen eine Berechnung für die Einzelinjektion einrichten. (Abb. 40)
- Mit dem zusammenfassenden Arbeitsblatt für Mehrfachinjektionen können Sie Berechnungen für die Mehrfachinjektion der gleichen Probe (eine Berechnung für alle Probentypen) einrichten. (Abb. 41)
- Mit dem Arbeitsblatt für Probentypgruppen können Sie Berechnungen für eine Gruppe des gleichen Probentyps und für benutzerdefinierte Probengruppen einrichten. (Abb. 42)

Existing variable/result addition (Hinzufügen bestehender Variablen/Ergebnisse)

In dem Rechenblatt fügen Sie zunächst eine Spalte für eine bestehende Variable oder ein Ergebnis ein, bevor Sie eine neue Formel oder Berechnung erstellen, die diese Variable bzw. das Ergebnis verwendet. Die bestehenden Variablen bzw. verfügbaren Ergebnisse hängen vom Probentyp ab.

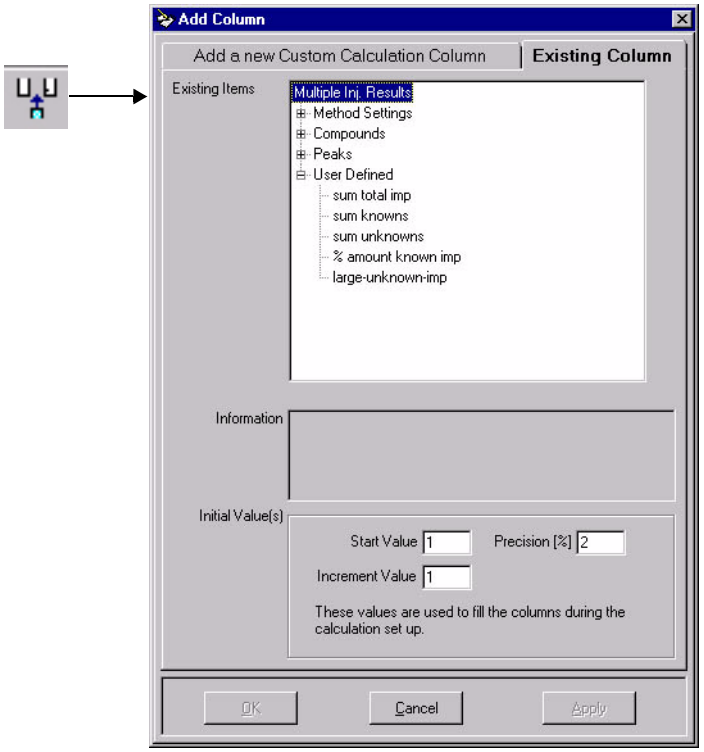


Abb. 39 Liste der bestehenden Variablen/Ergebnisse für die zusammenfassenden Berechnungen der Mehrfachinjektion

Variablen oder Ergebnisse von Einzelinjektionen

- Methode und Probenvariablen
- Substanzintegration und Quantifizierungsergebnisse
- Peakintegration und Quantifizierungsergebnisse
- Benutzerdefinierte Probenvariablen (eingerichtet im Abschnitt Sample Variables der Methode).

Zusammenfassende Variablen und Ergebnisse von Mehrfachinjektionen

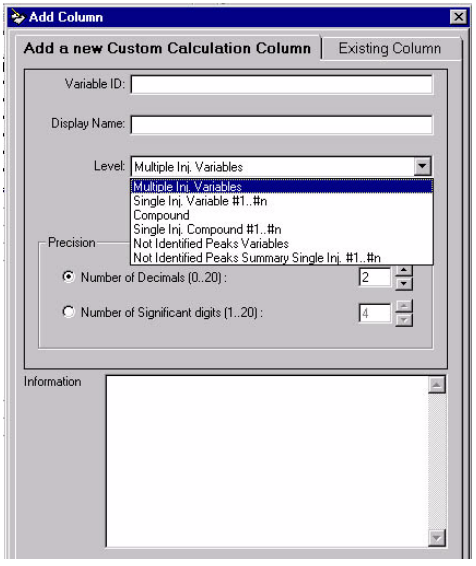
- Methodenvariablen
- Substanzintegration und Quantifizierungsergebnisse
- Peakintegration und Quantifizierungsergebnisse
- Benutzerdefinierte Variablen oder Ergebnisse - dies sind die Ergebnisse der benutzerdefinierten Berechnung mit der Formel, die im Arbeitsblatt für Einzelinjektionen erstellt wurde.

Gruppenvariablen oder Ergebnisse von Probentypen

Nur die benutzerdefinierten Ergebnisse der benutzerdefinierten Berechnungen aus dem zusammenfassenden Arbeitsblatt für Mehrfachinjektionen sind als Variablen für die Berechnung einer Probentypgruppe verfügbar.

Die Benutzeroberfläche des Editors für die Cerity-Reportvorlagen und das Glossar der Online-Hilfe enthält Beschreibungen aller Variablen und Ergebnisse, die für eine benutzerdefinierte Berechnung verfügbar sind.

New custom calculation setup (Erstellen einer neuen benutzerdefinierten Berechnung) Sie müssen ebenfalls eine Spalte zum Arbeitsblatt hinzufügen, um die Formel für eine benutzerdefinierte Berechnung zu erstellen, deren Ergebnis als Variable für eine andere Berechnung verwendet werden kann. Sie müssen für die einzurichtende Berechnung sowohl den anzuzeigenden Namen als auch die System-ID eintragen.



Ein *Level* (Stufe) ist eine Zeile des Arbeitsblattes, die die Formel oder das Ergebnis der neuen Berechnung enthält.

Sie können für die Berechnung auch eine *Stufe* wählen. Berechnungsstufen eines Arbeitsblattes hängen vom Ergebnistyp ab. Die folgenden Beispiele eines Arbeitsblattes und die Beispiele auf der nächsten Seite zeigen Ihnen die für die Berechnung auswählbaren Stufen.

Stufen für das Arbeitsblatt für Einzelinjektionen

Die folgende Abbildung beschreibtdie Stufen einer Einzelinjektion.

Stufe der Einzelinjektionsvariable - Diese Zeile enthält die Formel für das Gesamtergebnis der Einzelinjektion.

Stufe zur Zusammenfassung identifizierter Substanzen und unidentifizierter Peaks - Diese Zeilen enthalten die Formeln für die Gesamtergebnisse aller identifizierten Substanzen oder nicht identifizierten Peaks.

Stufen für identifizierte Substanz oder unidentifizierten Peak #1..#n – Diese Zeilen enthalten Formeln für einzelne Substanz- oder Peakberechnungen.

	A B C	D	E	F	G	H
1				New	New	New
2		Amount	Peak Area	Perc. of Nicotin	Sum Metabolites	AreaSum not ident. Peaks
3	-			%	mg/kg	
4	Single Inj. Results					
5	Single Inj. Variables				2.996	
6	- Identified Compounds					
7	Nicot. Metabolit I	0.9993	1.0097	24.885		
8	Nicot. Metabolit II	1.9968	1.9896	49.724		
9	PCH	3.0126	2.9811			
10	Nicotin	4.0158	3.9833			
11	- Not Identified Peaks					18.005
12	Unknown 1		5.0455			
13	..		6.0103			
14	Unknown n		6.9492			

Abb. 40 Arbeitsblatt für Einzelinjektionen

Stufen eines Arbeitsblattes für Mehrfachinjektionen

Die folgende Abbildung zeigt die Stufen für die Zusammenfassung einer Mehrfachinjektion.

Stufe der Mehrfachinjektionsvariablen - Diese Zeile enthält die Formel zur Berechnung von Gesamtergebnissen aller Einzelinjektionen.

Stufe der Einzelinjektionsvariable #1..#n - Diese Zeilen enthalten die Formeln zur Berechnung der Ergebnisse der Einzelinjektionen aus den Variablenberechnungen für Einzelinjektionen des Arbeitsblattes für Einzelinjektionen.

Stufen für die Zusammenfassung identifizierter Substanzen oder unidentifizierter Peaks - Diese Zeilen enthalten die Formeln für die Gesamtergebnisse aller Einzelinjektionen für eine Substanz oder Peak.

Stufen für identifizierte Substanzen oder unidentifizierte Peaks #1..#n — Diese Zeilen enthalten die Formeln zur Berechnung der jeweiligen Einzelinjektion für jede Substanz oder Peak.

	A B C	D	E	F	G	H	I
1				New	New		New
2		Amount	Sum Metabolites	Mean Amount	RSD of Sum Amount Metabolites	AreaSum not ident. Peaks	Mean of AreaSum not ident. Peaks
3	-		mg/kg	mg/kg	%		
4	Multiple Inj. Results						
5	- Multiple Inj. Variable				12.58		
6	Single Inj. #1		2.996				
7	..		3.182				
8	Single Inj. #n		3.978				
9	- Nicot. Metabolit I			1.777			
10	Single Inj. #1	0.9993					
11	..	1.9496					
12	Single Inj. #n	2.3811					
13	- Nicot. Metabolit II			3.018			
14	Single Inj. #1	1.9968					
15	..	3.0455					
16	Single Inj. #n	4.0103					
17	+ PCH			7.975			
21	- Nicotin			5.347			
22	Single Inj. #1	4.0158					
23	..	5.9183					
24	Single Inj. #n	6.1065					
25	- Not Identified						18.78
26	Single Inj. #1					18.005	
27	..					17.345	
28	Single Inj. #n					20.999	

Abb. 41 Zusammenfassendes Arbeitsblatt für Mehrfachinjektionen

Stufen für das Arbeitsblatt für Probentypgruppen

Die Abb. 42 beschreibt die Stufen der Probentypgruppen.

Variablenstufe der Probentypgruppe - Diese Zeile enthält die Formel für ein zusammenfassendes Ergebnis für jede Probengruppe der Tabelle.

Stufe für die Zusammenfassung von Mehrfachinjektionen (Proben) Variable #1..#n - Diese Zeile enthält die Formeln für die Berechnungen mit den Variablen der Mehrfachinjektion, die im Arbeitsblatt für die Zusammenfassung von Mehrfachinjektionen erstellt sind.

Stufen für die Zusamenfassung identifizierter Substanzen oder unidentifizierter Peaks - Diese Zeilen enthalten die Formeln für zusammenfassende Ergebnisse für alle Gruppenproben einer Substanz oder eines Peaks.

Stufen für die identifizierten Substanzen oder unidentifizierten Peaks #1..#n levels - Diese Zeilen enthalten Formeln für die Berechnungen einzelner Gruppenproben für jede Substanz oder Peak.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1					New		New		New
2				Mean Amount	Mean Amount per Lot	RSD of Sum Amount Metabolites	Mean of RSD Metabolites	Mean of AreaSum not ident. Peaks	Mean AreaSum per Lot
3	-			mg/kg	mg/kg	%	%		
4	User Sample Groups								
5		-	Sample Group Variable				12.59		
6			Sample Inj. #1			12.58			
7			..			12.02			
8			Sample Inj. #n			12.97			
9		-	Nicot. Metabolit I		2.002				
10			Sample Inj. #1	1.777					
11			..	1.996					
12			Sample Inj. #n	3.002					
13		-	Nicot. Metabolit II		4.995				
14			Sample Inj. #1	3.018					
15			..	4.988					
16			Sample Inj. #n	5.982					
17		+	PCH		8.003				
21		-	Nicotin		10.933				
22			Sample Inj. #1	5.347					
23			..	10.980					
24			Sample Inj. #n	11.883					
25		-	Not Identified						22.295
26			Sample Inj. #1					18.78	
27			..					22.02	
28			Sample Inj. #n					22.97	

Abb. 42 Arbeitsblatt für eine Probentypgruppe

Im Referenzabschnitt der Onlinehilfe finden Sie Definitionen aller zur Verfügung stehender Funktionen und bedingter Anweisungen.

Funktionen und bedingteAnweisungen

Um eine Formel zu erstellen, müssen Sie eine mathematische Funktion oder eine bedingte Anweisung und die Zeile, auf die sie sich bezieht, in eine einzelne Zelle eintragen. Eine Berechnung muss mit dem Gleichheitszeichen (=) beginnen. Zum Beispiel sieht der Eintrag in der Zelle in der obigen Abbildung zur Berechnung des Mittelwertes der Menge an Nikotin-Metabolit pro Charge wie folgt aus:
=AVERAGE(D10:D12)

Sie erhalten eine vollständige Liste der mathematischen Funktionen des Arbeitsbereichs Custom Calculation (benutzerdefinierte Berechnungen), indem Sie in der Symbolleiste auf die Schaltfläche **Function** (Funktion) klicken.

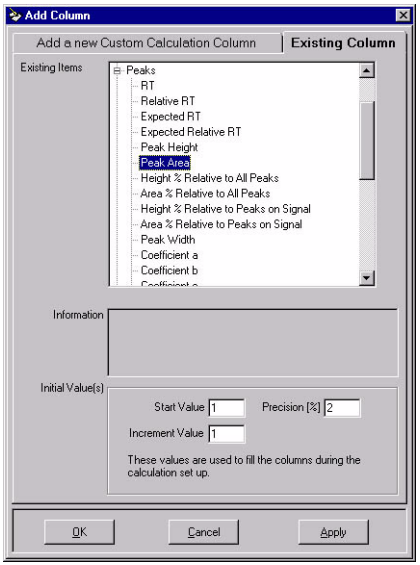
Angezeigte Werte während der Einrichtung

Während der Einrichtung der Berechnung erzeugt Cerity NDS für pharmazeutische QA/QC Zufallszahlen zum Auffüllen der Zellen, da nicht immer bereits Ergebnisse vorliegen.

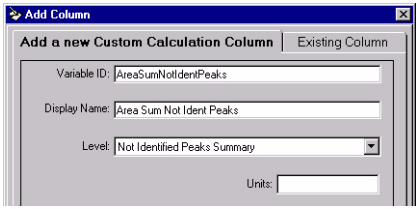
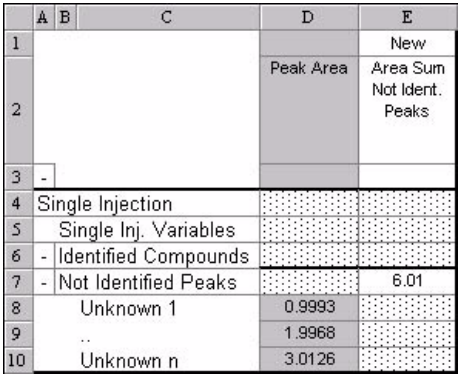
Beispiel **Mittlere Flächensumme der nicht identifizierten Verunreinigungen pro Charge** Um das Konzept zur Einrichtung benutzerdefinierter Berechnungen zu veranschaulichen, liefert dieser Abschnitt ein Beispiel, das Sie in Ihrem Laboratorium verwenden können.

Sie können eine benutzerdefinierte Berechnung des Mittelwertes der Flächensummen der nicht identifizierten Verunreinigungen pro Charge der Proben erstellen. Für diese Berechnung müssen Sie die Substanzen nicht identifizieren, daher können Sie folgenden Anweisungen mit einer leeren Methode durchführen.

Aufgabe 1 Einrichten der Peakflächensummierung von nicht identifizierten Peaks bei einer Einzelinjektion

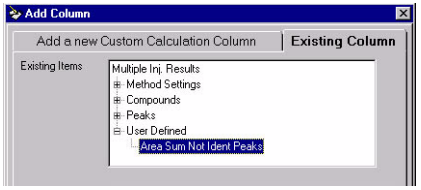
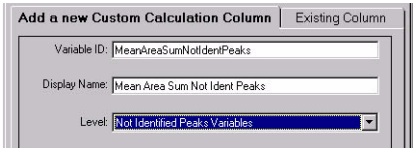
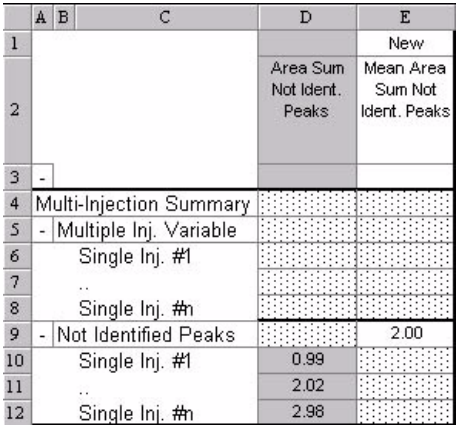
Schritte	Ergebnis
1 Fügen Sie im Arbeitsblatt für eine Einzelinjektion eine Spalte mit dem bestehenden Integrationsergebnis, der Peakarea (Peakfläche), ein	 Der Arbeitsbereich enthält nun eine Spalte mit den Peakflächen für die nicht identifizierten Peaks.

Aufgabe 1 Einrichten der Peakflächensummierung von nicht identifizierten Peaks bei einer Einzelinjektion (fortsetzung)

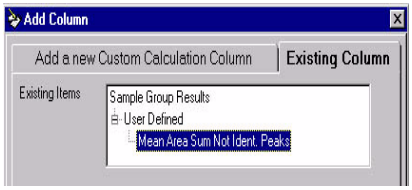
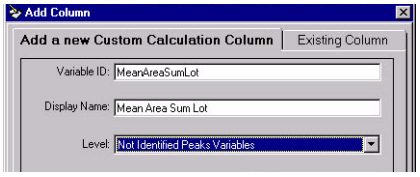
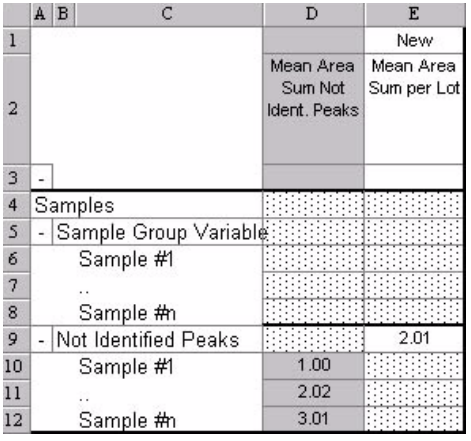
Schritte	Ergebnis
2 Fügen Sie eine Spalte mit der neuen Berechnung für die Flächensumme der nicht identifizierten Peaks hinzu. (Hinweis: Stufe für Peaksumme nicht identifizierter Peaks)	 Der Arbeitsbereich enthält nun eine Spalte für die neue Variable Area Sum Not Ident Peaks.
3 Tragen Sie die Formel für die Flächensummierung der nicht identifizierten Peaks ein. (Hinweis: Benutzen Sie die Syntax: =SUM(D8:D10))	

	A	B	C	D	E
1					New
2				Peak Area	Area Sum Not Ident. Peaks
3	-				
4			Single Injection		
5			Single Inj. Variables		
6		-	Identified Compounds		
7		-	Not Identified Peaks		6.01
8			Unknown 1	0.9993	
9			..	1.9968	
10			Unknown n	3.0126	

Aufgabe 2 Bilden Sie den Mittelwert der Flächensummen der nicht identifizierten Peaks für alle Injektionen einer Probe

Schritte	Ergebnis
1 Fügen Sie im Arbeitsblatt für die Zusammenfassung einer Mehrfachinjektion eine Spalte zur Aufnahme der im Arbeitsblatt für Einzelinjektion erstellten Variablen, der Flächensumme von nicht identifizierten Peaks.	 Der Arbeitsplatz enthält nun eine Spalte mit der Flächensumme für die nicht identifizierten Peaks.
2 Fügen Sie eine Spalte hinzu, die die neue Berechnung für den Mittelwert der Flächensummen von nicht identifizierten Peaks aller Injektionen enthalten soll. (Hinweis: Stufe für Variable der nicht identifizierten Peaks)	 Der Arbeitsbereich enthält nun eine Spalte für die neue Variable Mean Area Sum Not Ident Peaks (mittlere Flächensumme nicht identifizierter Peaks).
3 Tragen Sie die Formel für den Mittelwert der Flächensummen der nicht identifizierten Peaks aller Injektionen ein. (Hinweis: Benutzen Sie die Syntax: =AVERAGE(D10:D12))	

Aufgabe 3 Berechnen Sie den Mittelwert der Flächensumme für die Proben einer Probengruppe

Schritte	Ergebnis
1 Fügen Sie zum Arbeitsblatt für die Probengruppe eine Spalte für die Variable aus dem Arbeitsblatt für Mehrfachinjektionen hinzu, den Mittelwert der Flächensummen aller Injektionen.	 Der Arbeitsbereich enthält nun eine Spalte mit der Mean Area Sum Not Ident. Peaks (Flächensumme für die nicht identifizierten Peaks).
2 Fügen Sie eine Spalte für die neue Berechnung des Mittelwertes der Flächensummen der nicht identifizierten Peaks einer Probencharge hinzu. (Hinweis: Stufe für Variable der nicht identifizierten Peaks)	 Der Arbeitsbereich enthält nun eine Spalte für die neue Variable Mean Area Sum Per Lot (mittlere Flächensumme pro Charge).
3 Tragen Sie die Formel für den Mittelwert der Flächensummen der Charge ein. (Hinweis: Benutzen Sie die Syntax: =AVERAGE(D10:D12))	

Andere Beispiele für benutzerdefinierte Berechnungen

Siehe "Erstellen einer Methode zur Bestimmung von Verunreinigungen" in den Übungen für Anwender, um die Erstellung einer benutzerdefinierten Berechnung zu erlernen.

Sie finden auch Anweisungen in der Onlinehilfe (HowTo/Setting Up Methods/Set up custom calculations) zur Einrichtung der folgenden benutzerdefinierten Berechnungen:

- Peakflächenstatistik für Mehrfachinjektionen
- % der bekannten Verunreinigungen
- % der bekannten Gesamtverunreinigungen
- % der unbekannten Verunreinigungen
- % der unbekannten Gesamtverunreinigungen
- Mittlere Responsefaktoren bei Mehrfachinjektionen
- Mittlerer Responsefaktor für jede Substanz in der Standardkalibriergruppe
- Standardabweichung des mittleren Responsefaktors für jede in den Standards enthaltene Substanz
- Relative Standardabweichung (RSD) des mittleren Responsefaktors für jede in den Standards enthaltene Substanz
- Relativer Responsefaktor (RRF) zwischen Peaks
- Präzision der Überprüfungsstandards im Vergleich zu den Kalibrierstandards
- Konzentration und tatsächliche Menge einer Probe
- Angepasste Mengen für einzelne Substanzen.

Beziehung zwischen Arbeitsblättern

Die Berechnungsblätter stehen untereinander in Beziehung, wie im obigen Beispiel und in Abb. 43 und Abb. 44 gezeigt. Die Ergebnisse des Einzelinjektions-Arbeitsblattes werden im Arbeitsblatt für die Zusammenfassung der Mehrfachinjektionen verwendet; diese Ergebnisse wiederum werden im Arbeitsblatt für Probentypgruppen benötigt.

Arbeitsblatt Einzelinjektion

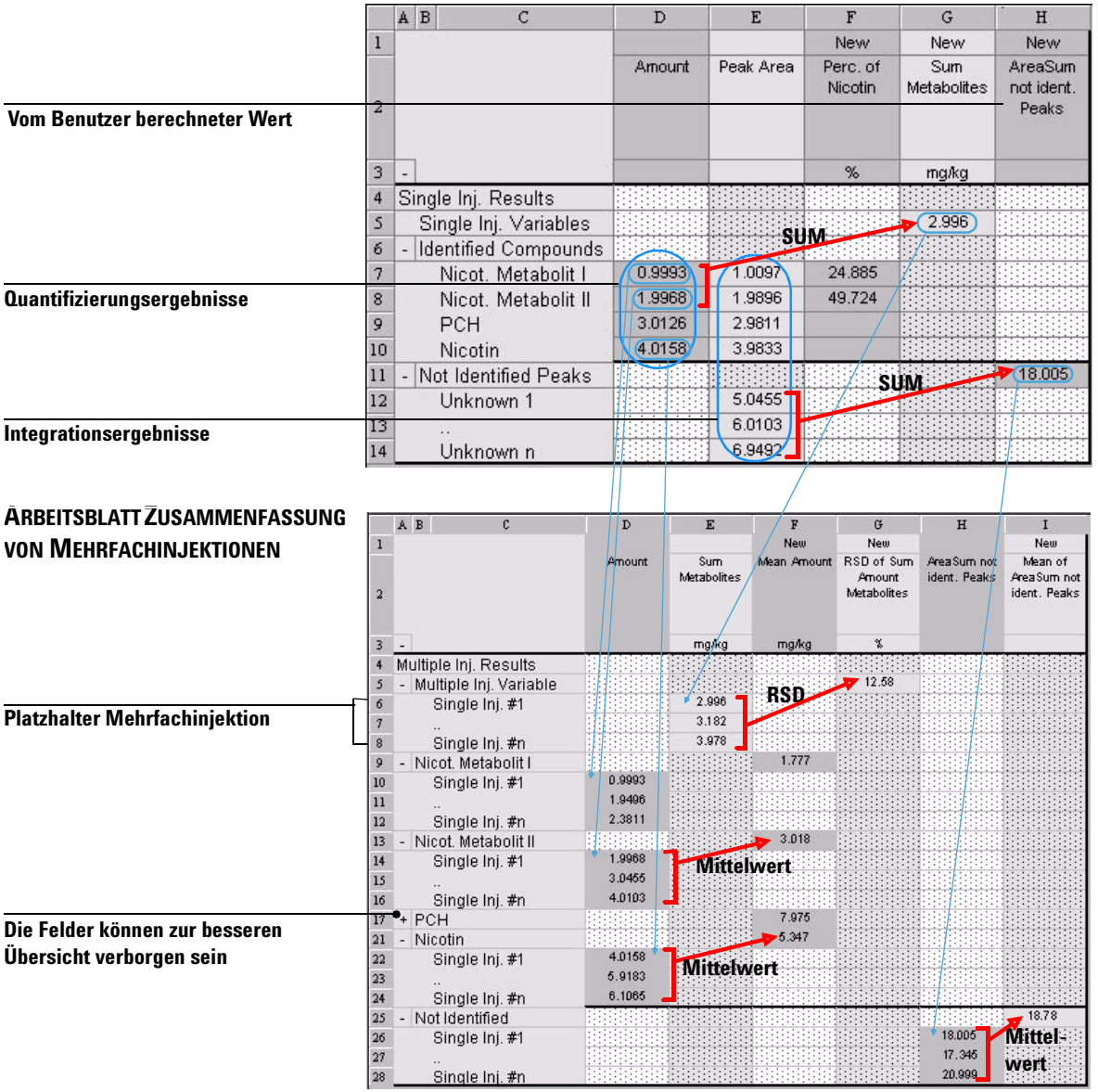


Abb. 43 Beziehung zwischen dem Arbeitsblatt für Einzelinjektion und dem Arbeitsblatt für die Zusammenfassung von Mehrfachinjektionen

Arbeitsblatt Zusammenfassung von Mehrfachinjektionen

Arbeitsblatt Probentypgruppe

Platzhalter Proben in der Probentypgruppe

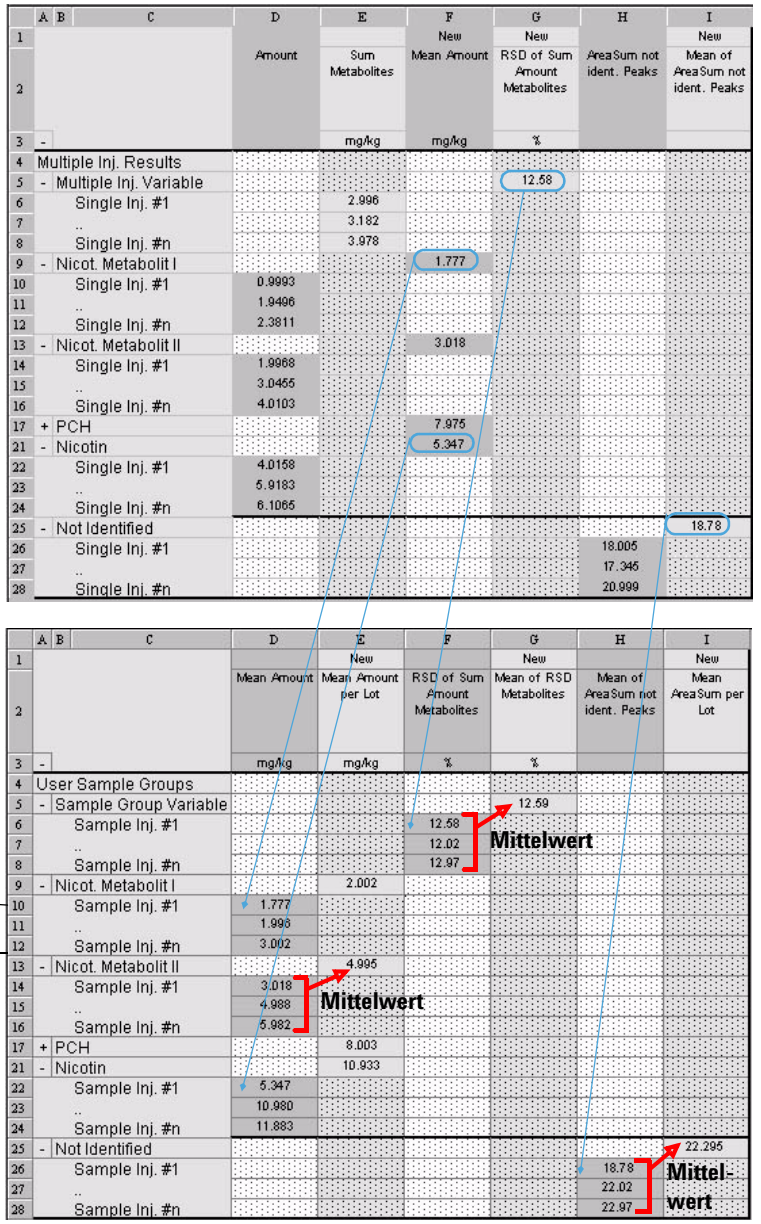


Abb. 44 Beziehung zwischen dem Arbeitsblatt Zusammenfassung von Mehrfachinjektionen und dem Arbeitsblatt für Probentypgruppen

Layout der Datenüberprüfung

Layoutarten

Cerity für die QA/QC zeigt die Ergebnisse in der Ergebnisansicht (Result View) für folgende Ergebnissätze an:

- Einzelinjektion, Zusammenfassung von Mehrfachinjektionen und Kalibrierungen.

Bei Sequenzen zeigt die Anwendung Ergebnisse für die folgenden Probentypgruppen an:

- QC-Probengruppen
- Probengruppe
- Kalibrierstandardgruppe
- Benutzerdefinierte Probengruppe.

Darstellungsauswahl

Im Abschnitt Data Review Layout der Methode können Sie zur Darstellung in der Ergebnisansicht die Ergebnisse und zusammenfassenden Tabellen sowie die Titelinformationen und Statuszeilen für jedes Ergebnis auswählen, jedoch mit folgenden Unterschieden.

- Nur bei der Anzeige für Ergebnisse der Einzelinjektion können Sie das Signal zur Darstellung auswählen.
- Nur bei der Anzeige der Kalibrierergebnisse können Sie sich die Kalibriertabelle und die Kurve anzeigen lassen.

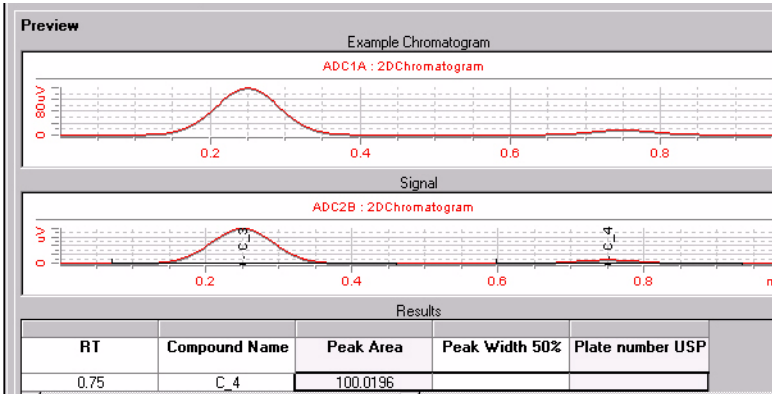
Ergebnisauswahl für die Ergebnistabelle

Für jede Tabelle, die Sie zur Ansicht auswählen, können Sie die Felder und Variablen aussuchen, die als Spaltentitel oder Elemente in der Tabelle angezeigt werden.

Die Felder und Variablen, die für jeden Ergebnissatz angezeigt werden, sind jene, die das System bereithält oder die Sie als benutzerdefinierte Variablen oder als benutzerdefinierte Berechnungsvariablen definiert haben. Nur die Variablen, die Sie für jede Probentypgruppe in den Custom Calculations (benutzerdefinierte Berechnungen) eingerichtet haben, erscheinen hier für diese Probentypgruppe.

Vorschau auf die Auswahl

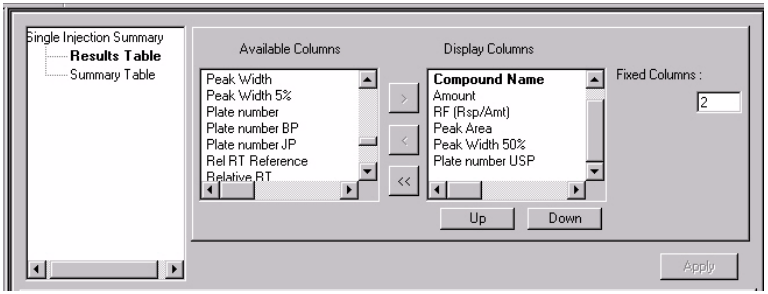
Wenn Sie eine Auswahl getroffen oder geändert haben, erscheint die Änderung im Abschnitt Preview des Arbeitsbereiches Data Review Layout. Die Änderung wird erst nach einem Klick auf die Schaltfläche **Apply** wirksam.



Systemeignung

Sie können in der Ansicht Result Review (Ergebnisansicht) Werte für die Systemeignung erstellen, wenn Sie in Cerity für die pharmazeutische QA/QC zwei Aufgaben ausführen:

- Aktivieren Sie das Auswahlkästchen für den Systemeignungstest im **Method Wizard** (Methodenassistenten).
- Wählen Sie die Systemeignungsberechnungen, die das System durchführen soll, im Bereich für Einzelinjektionen des Data Review Layout aus.



Die Ergebnisse der Systemeignung erscheinen dann in der Results Table (Ergebnistabelle) für Einzelinjektionen.

Reporterstellung

Cerity NDS für die pharmazeutische QA/QC bietet eine einfache Reporterstellung. Die Reports können Folgendes enthalten:

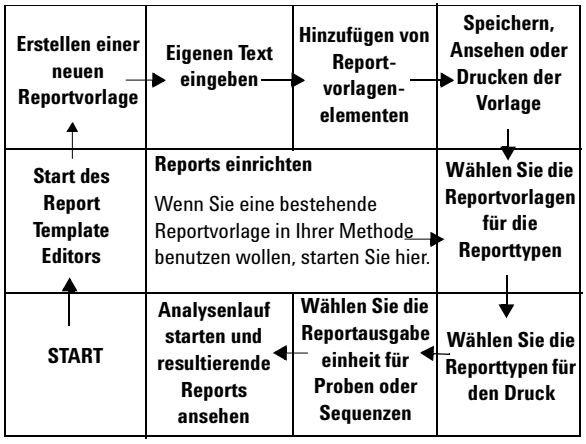
- Chromatogramme und Abbildungen
- Ergebnisse und Zusammenfassungstabellen
- Standard- und benutzerdefinierte Berechnungen
- Kopf- und Fusszeileninformationen

Das Technische Referenzbuch enthält weitere Details dazu, wie Cerity für pharmazeutische QA/QC Reports erzeugt.

Die Reports werden nach Abschluss der Quantifizierung einer Probe erstellt. Die Reporterzeugung organisiert und zeigt Felder und Ergebniswerte für die Reporttypen mittels vordefinierter Vorlagen. Die Reporterstellung führt keine Berechnungen durch. Reporttypen und -vorlagen wählen Sie in der Methode aus. Die Reports sehen Sie sich im Cerity Report Viewer an und können sie von dort aus auch drucken.

Das folgende Ablaufschema zeigt die Schritte zum Einrichten, Erstellen und Betrachten von Reports für Analytiker und fortgeschrittene Benutzer. Beginnen Sie bei **START.**

Wenn Sie eine Reportvorlage für Ihre Methode erstellen oder ändern müssen, **beginnen Sie hier**.


Erstellen einer neuen Reportvorlage
Eigenen Text eingeben
Hinzufügen von Report-vorlagen-elementen
Speichern, Ansehen oder Drucken der Vorlage
Start des Report Template Editors
Reports einrichten
Wenn Sie eine bestehende Reportvorlage in Ihrer Methode benutzen wollen, starten Sie hier.
Wählen Sie die Reportvorlagen für die Reporttypen
START
Analysenlauf starten und resultierende Reports ansehen
Wählen Sie die Reportausgabe einheit für Proben oder Sequenzen
Wählen Sie die Reporttypen für den Druck

Die nun folgenden Abschnitte bieten Hintergrundinformationen, die Ihnen zum Verständnis dieses Ablaufs dienen.

Reporttypen

Ein *Reporttyp* ist die Art für einen Ergebnistyp erstellten Report.

Wenn Sie eine Methode erstmalig erstellen, wählen Sie die Reporttypen aus, die Sie ausgeben wollen, wenn eine Probe oder eine Sequenz mit dieser Methode analysiert wird. Die verfügbaren Reporttypen für diese Methode erscheinen im Arbeitsbereich Reporting. Sie können zur Liste der Reporttypen keine neuen Reporttypen hinzufügen.

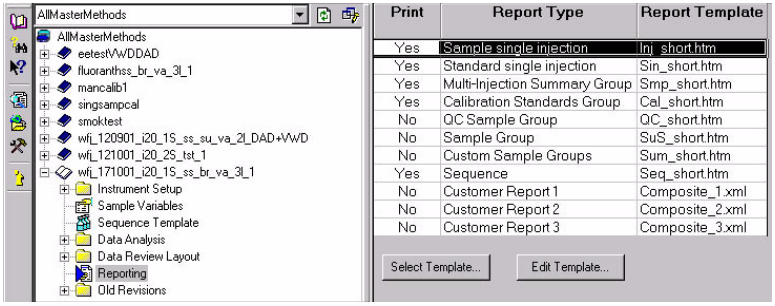


Abb. 45 Der Arbeitsbereich Report in der Methodenansicht

Reporttypen für einzelne Proben

Methoden, die für einzelne Proben erstellt wurden, bieten Reporttypen für drei Ergebnistypen an:

- Einzelinjektion Probe
- Einzelinjektion Standard
- Zusammenfassung von Mehrfachinjektionen.

Reporttypen für Sequenzen

Die Methodenerstellung für Sequenzen enthält elf Reporttypen:

- Einzelinjektion Probe
- Einzelinjektion Standard
- Zusammenfassung von Mehrfachinjektionen
- Kalibrierstandardgruppe
- QC-Probengruppen
- Probengruppe
- benutzerdefinierte Probengruppen
- Sequenz
- Benutzerdefinierte Reports 1, 2 oder 3.

Report destination (Reportausgabeeinheit)

Sie können den zu druckenden Reporttyp in der Method View (Methodenansicht) ändern, wenn Sie eine einzelne Probe eingeben oder eine Sequenz erstellen. Dies geschieht in der Registerkarte **Report Destination** des Fensters **Sample Entry** (Probeneingabe) in der Sample View (Probenansicht).

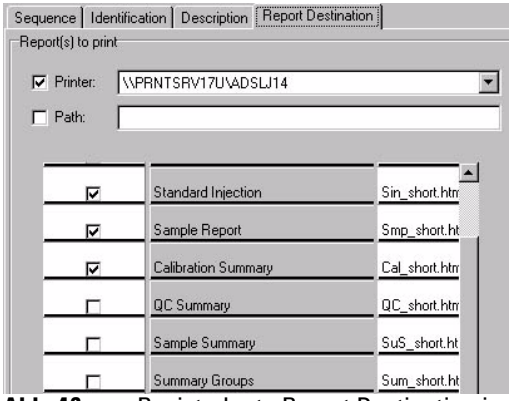


Abb. 46 Registerkarte Report Destination im Fenster Sequence Options

Sie müssen den Namen der Probe oder Sequenz zum Pfad hinzufügen, damit die Reports für die Probe oder Sequenz schnell gefunden werden.

Der Cerity NDS Administrator richtet den Pfad und den Drucker für die Speicherung und den Druck Ihrer Reports ein. Sie können im Fenster Sample Entry in der Registerkarte Report Destination den Drucker für den Ausdruck der Reports ändern, ebenso wie den Pfad zur Speicherung Ihrer Reports.

Report templates (Reportvorlagen)

Eine *Reportvorlage* ist eine grundlegende Struktur, die die Gestaltung der Felder, Kurven, Abbildungen und Tabellen für die Werte enthält, die im Report erscheinen sollen.

Jeder Reporttyp ist mit einer Standardreportvorlage verknüpft, die einen Report des ausgewählten Typs erzeugt. Wenn eine Probe oder Sequenz läuft, gibt die Reportvorlage Anweisungen an die Datenbank aus, um den Report mit den Werten der im Layout erstellten Felder und Variablen und dem Inhalt der Reportvorlage zu füllen.

Bei der Auswahl der Reportvorlage haben Sie drei Möglichkeiten:

- Sie können die Standardvorlage nehmen, die bereits mit dem Reporttyp verbunden ist
- Sie können eine andere Standardreportvorlage für diesen Reporttyp nehmen.
- Sie können eine neue Reportvorlage erstellen oder eine bestehende ändern, bevor Sie die Vorlage für den Reporttyp wählen.

Wenn Sie eine Vorlage für einen Reporttyp ändern möchten, erscheinen im Cerity-Reportvorlageneditor nur die Vorlagen für diesen Typ.

Der Cerity Report Template Editor (Reportvorlageneditor)

Mit dem Cerity Report Template Editor können Sie Reportvorlagen erstellen und ändern. Verwenden Sie den Cerity-Reportvorlageneditor, um die Reports von Cerity NDS für die pharmazeutische QA/QC an Ihre Bedürfnisse anzupassen.

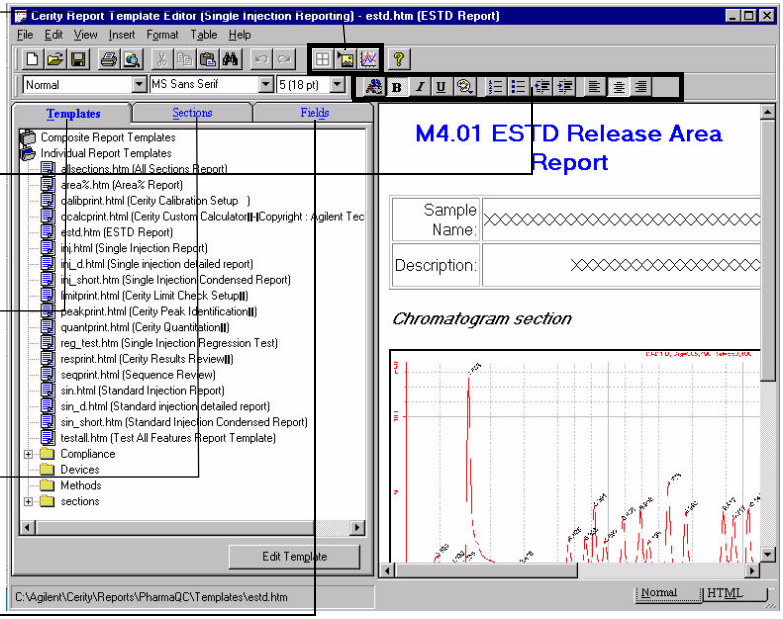
Symbolleiste Einfügen– Mit diesen Werkzeugen können Sie eine Tabelle, eine Abbildung oder ein Chromatogramm in eine Vorlage einfügen.

Symbolleiste Format - Mit diesen Werkzeugen können Sie den Text der Vorlage und/oder des Reports formatieren.

Registerkarte Template (Vorlage) – Wählen Sie aus dieser Registerkarte eine Vorlage zur Änderung aus. Die Vorlage erscheint im Arbeitsbereich.

Registerkarte Sections (Abschnitte) – Wählen Sie aus dieser Registerkarte einen Abschnitt zum Einfügen in die Vorlage aus.

Registerkarte Fields (Felder) – Wählen Sie aus dieser Registerkarteein Feld oder eine Variable zum Einfügen in die Vorlage aus.



Strukturansicht **Arbeitsbereich**

Neue Reportvorlagen

Sie können mit dem Erstellen einer neuen Reportvorlage beginnen, indem Sie im Cerity Report Template Editor auf die Schaltfläche **New** klicken.

Der Cerity Report Template Editor bietet zwei Vorlagentypen, die Individual Report Templates (individuelle Reportvorlagen) und die Composite Report Templates (kombinierte Reportvorlagen).

Individuelle Reportvorlagen

Verwenden Sie die Individual Report Templates, um einfache Elemente wie Tabellen, Chromatogramme, Abbildungen oder Felder einzufügen.

Die individuelle Reportvorlage beinhaltet:

- Einzelinjektionsreport
- Methodenreports
- Compliance Reports
- Einheitenreports

Nachdem Sie ”new.htm” gewählt haben, um eine neue individuelle Reportvorlage zu erstellen, erscheint im Arbeitsbereich eine Reportvorlage mit der Überschrift Report Title. Sie müssen die neue Reportvorlage benennen und speichern, damit die Vorlage im Ordner Individual Report Templates erscheint.

Kombinierte Reportvorlagen

Die kombinierten Reportvorlagen ermöglichen das Einfügen mehrerer bestehender individueller Vorlagen in die endgültige Reportvorlage.

Kombinierte Reportvorlagen beinhalten:

- Mehrfachinjektionsreports
- Sequenzreports

Sie können *Vorlagen für Mehrfachinjektionreports* aus individuellen Vorlagen erstellen, indem Sie folgende Reportbestandteile nutzen:

- Deckblatt
- Gerät
- Zusammenfassung von Mehrfachinjektionen

- Einzelne Injektionen
- Standardinjektionen

Die gespeicherte Reportvorlage erscheint als XML-Datei im Ordner Composite Report Templates.

Sie können *Sequenzvorlagen* aus individuellen Vorlagen erstellen, indem Sie folgende Reportbestandteile benutzen:

- Deckblatt
- Sequenz
- Gerät
- Benutzerdefinierte Probengruppe
- Probengruppe
- QC-Probengruppen
- Kalibrierstandardgruppe
- Zusammenfassung von Mehrfachinjektionen
- Einzelinjektionen
- Standardinjektionen

Die gespeicherte Reportvorlage erscheint als XML-Datei im Ordner Composite Report Templates.

Template titels (Vorlagentitel)

Der Vorlagentitel ist nach dem Speichern der Datei an folgenden Stellen zu sehen:

- als Beschreibung des Namens der Vorlagendatei bzw. des Namens der Abschnittsdatei
- in der Titelleiste des Microsoft Internet Explorer, wenn Sie sich eine Vorlage ansehen
- als Name der Datei, wenn Sie die Vorlage zum ersten Mal speichern.

Der Vorlagentitel und die Reportüberschrift, die in der neuen Vorlage erscheinen, sind nicht identisch. Sie können die Reportüberschrift gemäß Ihrem Bedarf ändern.

Neue Vorlagen aus bestehenden Vorlagen

Sie können neue Reportvorlagen aus den bestehenden Cerity-NDS Standardreportvorlagen oder aus Ihren eigenen Reportvorlagen erstellen. Alle Reportvorlagen werden in der Registerkarte **Templates** (Vorlagen) angezeigt. Nachdem Sie eine bestehende Reportvorlage gewählt und geändert haben, müssen Sie die neue Reportvorlage unter einem neuen Dateinamen speichern. Die neue Reportvorlage erscheint in den Ordnern Individual oder Composite Report Templates.

Texteditor

Der Texteditor für den Cerity Report Template Editor verwendet die üblichen Werkzeuge wie die meisten Textverarbeitungsprogramme. Zu Anfang der Bearbeitung Ihrer neuen Reportvorlage steht der Cursor zur Änderung der Reportüberschrift bereit. Wenn Sie zum Report ein neues Element hinzufügen wollen, müssen Sie den Cursor unter die Reportüberschrift setzen.

Eigener Text kann im Report folgendermaßen gestaltet werden:

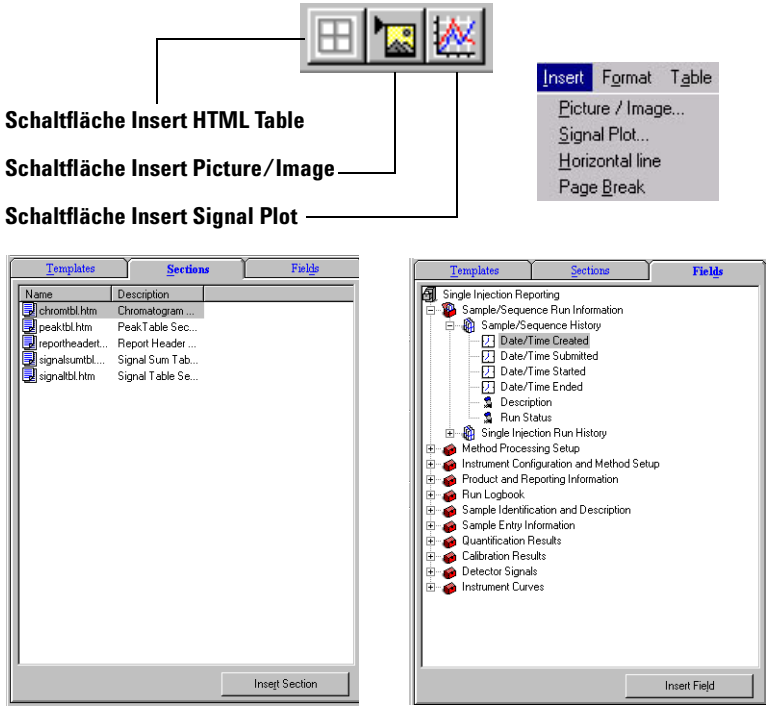
- Feldnamen und Beschreibungen können eingetragen werden.
- Schriftart und -größe des Textes kann geändert werden.
- Die Position des Textes kann geändert werden.
- Hervorhebungen im Text können geändert werden.
- Eine nummerierte oder mit Aufzählungszeichen versehene Liste kann erstellt werden.
- Die Hintergrundeigenschaften können eingestellt werden.
- Die Ausrichtung des Textes kann geändert werden.
- Das Aussehen des Absatzes kann geändert werden.
- Die Textfarbe kann geändert werden.
- Die normale Formatierung kann wiederhergestellt werden.
- Kopf- und Fußzeile können erstellt und geändert werden.

Reportvorlagenelemente

Der Cerity Report Template Editor stellt Sections (Abschnitte) und Fields (Felder) für das Einsetzen in Reportvorlagen zur Verfügung. Sie können gespeicherte individuelle Reportvorlagen als Abschnitt einfügen. Dieser Abschnitt erscheint in der Registerkarte **Sections** des Cerity-Reportvorlageneditors.

Die Registerkarte **Fields** zeigt alle verfügbaren Felder der Proben-, Methoden-, Geräte- und Ergebnisansicht an.

Sie können einzelne Felder, Tabellen, Abbildungen, Signalverläufe und andere Reportelemente in eine Reportvorlage einfügen.



Reportelementformate

Formate können in den Dialogfeldern **Picture/Image**, **Signal Plot** und **Table** eingestellt werden. Wählen Sie in jedem Dialogfeld Ihre Formatoptionen aus. Für Abschnitte oder einzelne Felder werden keine Formate eingerichtet.

Reportvorlagen ansehen oder drucken

Im Arbeitsbereich des Report Template Editor können Sie nur die Reportvorlage drucken, die dort erscheint. Wenn Sie im Menü **File** (Datei) den Punkt **Preview Template** (Vorlagenvorschau) auswählen, können Sie die Vorlage auf Vollständigkeit prüfen und diese ausdrucken. Sie können die Vorlage vom Microsoft Internet Explorer aus drucken.

Speichern einer Reportvorlage

Bei der Speicherung der Reportvorlage gibt es mehrere Optionen:

- Speichern Sie die Reportvorlage nach dem Ändern unter demselben Namen.

  Cerity NDS für die pharmazeutische QA/QC enthält Standardvorlagen, die nur gelesen, nicht bearbeitet werden können. Diese Vorlagen können Sie nur dann ändern, wenn der Cerity NDS Administrator für das Vorlagenverzeichnis Lese-/Schreibrechte festlegt.
- Speichern Sie eine Reportvorlage nach dem Ändern als neue Datei ab. Verwenden Sie hierzu den Befehl **Save as** (Speichern unter) im Menü **File** (Datei).
- Speichern Sie die Reportvorlage als Section (Abschnitt).

  Sie müssen den Titel der Reportvorlage ändern, bevor Sie den Dateinamen der Reportvorlage ändern. Die neue Vorlage erscheint in der Registerkarte **Sections** und im Ordner Sections unter der Registerkarte **Templates**. Sie können nun den Abschnitt einer anderen Vorlage hinzufügen.

Cerity Report Viewer (Reportbetrachter)

Der Cerity NDS Administrator richtet den Pfad zu dem Verzeichnis ein, das Ihre Reports speichert. Der Cerity Report Viewer (Reportbetrachter) öffnet das Verzeichnis, in dem Sie Ihre Reports für Proben und Sequenzen speichern. Sie können den Report nur vom Cerity Report Viewer aus drucken.

Methodenreports können Sie vom Menü **File** (Datei) in der Method View (Methodenansicht) aus drucken. Die Datenbank füllt die Felder innerhalb der Methodenvorlage auf und stellt den Bericht in den Cerity Report Viewer. Sie können den Report im Report Viewer ausdrucken.

5
Verwaltungs- und Wartungsprogramme

Schritte nach erfolgter Installation 148
Cerity NDS Systemverwaltung und Wartung 154

Mit den Verwaltungs- und Wartungsprogrammen des Cerity NDS für die pharmazeutische QA/QC richtet der Systemadministrator das Cerity NDS Ihres Laboratoriums ein und verwaltet es damit. Dieses Kapitel bietet dem Administrator Konzepte als Hilfestellung für seine Aufgabe im Laboratorium.

Schritte nach erfolgter Installation

Nach der Installation der Software Cerity NDS für pharmazeutische QA/QC muss der Cerity NDS Systemadministrator die Cerity NDS Benutzer für die Verwendung der Anwendung für pharmazeutische QA/QC einrichten.

Der Cerity-NDS-Systemadministrator muss folgende Aufgaben durchführen:

Die Online-Hilfe zur Systemverwaltung enthält Anleitungen zur Durchführung dieser Aufgaben.

- die Anwendung Cerity NDS Administration starten
- eine Verbindung zur Datenbank herstellen
- die Konfiguration bootp einstellen (nur wenn das Labor kein DHCP für die Geräte verwendet)
- lizenzen hinzufügen
- die vollständige Installation überprüfen
- einen Standarddrucker für den Cerity NDS Servicetechniker bestimmen
- die Systemzeit der Cerity NDS Rechner synchronisieren
- benutzer hinzufügen
- steuereinheiten für die Datenaufnahme hinzufügen
- geräte hinzufügen
- zusatzgeräte hinzufügen
- änderungen in der Datenbank speichern

Die Konzepte in diesem Abschnitt helfen dem Systemadministrator bei der Wahrnehmung dieser Aufgaben.

Anwendung für die Cerity NDS Administration

Benutzen Sie für die Systemverwaltung die Konfigurationswerkzeuge der Cerity NDS Administration. Wählen Sie aus dem Startmenü den Menüpunkt **Cerity Software Administration**, um das Konfigurationsfenster zu öffnen.

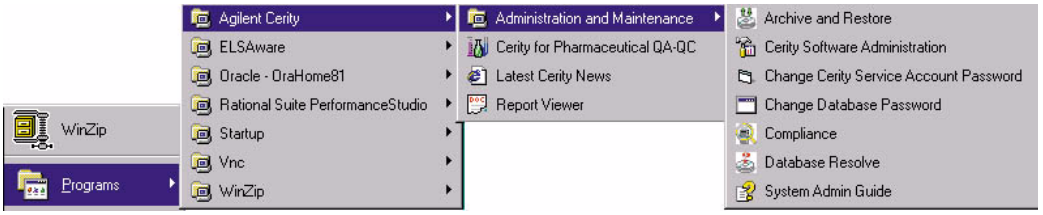


Abb. 47 Menüpunkt Cerity NDS Administration

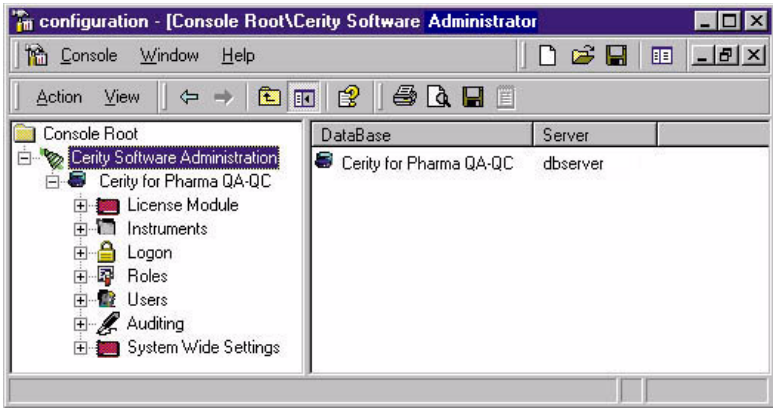


Abb. 48 Konfigurationsfenster Cerity NDS Administration

Verbindung zu einer Datenbank

Sie müssen die Datenbank hinzufügen, die das Konfigurationswerkzeug der Cerity Software Administration verwaltet. Ein Rechtsklick auf den Ordner Cerity Software Administration im Hauptfenster ermöglicht das Hinzufügen einer Datenbank. Öffnen Sie nach dem Hinzufügen der Datenbank den Datenbankordner, um Zugang zu den Eigenschaften und Einstellungen zu erhalten.

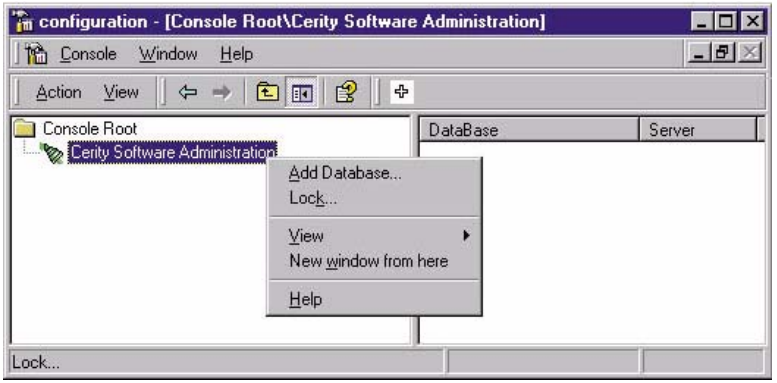


Abb. 49 Kontextmenü zum Hinzufügen einer Datenbank

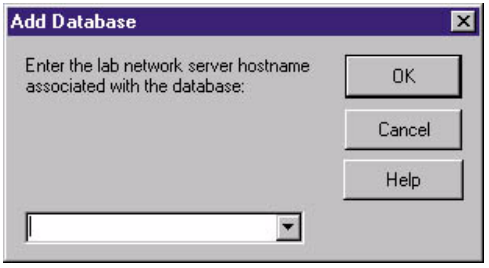


Abb. 50 Dialogfeld Add Database (Datenbank hinzufügen)

Wenn dies eine Einzelplatzinstallation (Cerity NDS Professional) ist, können Sie den Namen des Einzel-PCs benutzen.

Cerity NDS Lizenzierung

Das System stellt während der Installation einen Satz Demo-Lizenzen für Ihre Geräte und Cerity NDS Module zur Verfügung. Dieser Lizenztyp ist zeitlich begrenzt. Sie dürfen diese Demo-Lizenz nicht länger als 30 Tage benutzen. Sie müssen von Agilent Technologies eine neue Lizenz erwerben, bevor die Demo-Lizenz abläuft. Nachdem Sie eine Lizenz gekauft haben, müssen Sie den Einsatz der neuen Lizenz gemäß den Lizenzbestimmungen bestätigen.

Der Ordner **License Module** (Lizenzmodul) bietet Ihnen die Möglichkeit:

- die eingesetzten Lizenzen für alle installierten Module zu betrachten
- die Lizenzbenutzung zu genehmigen
- eine Cerity NDS Lizenz zu aktualisieren oder hinzuzufügen

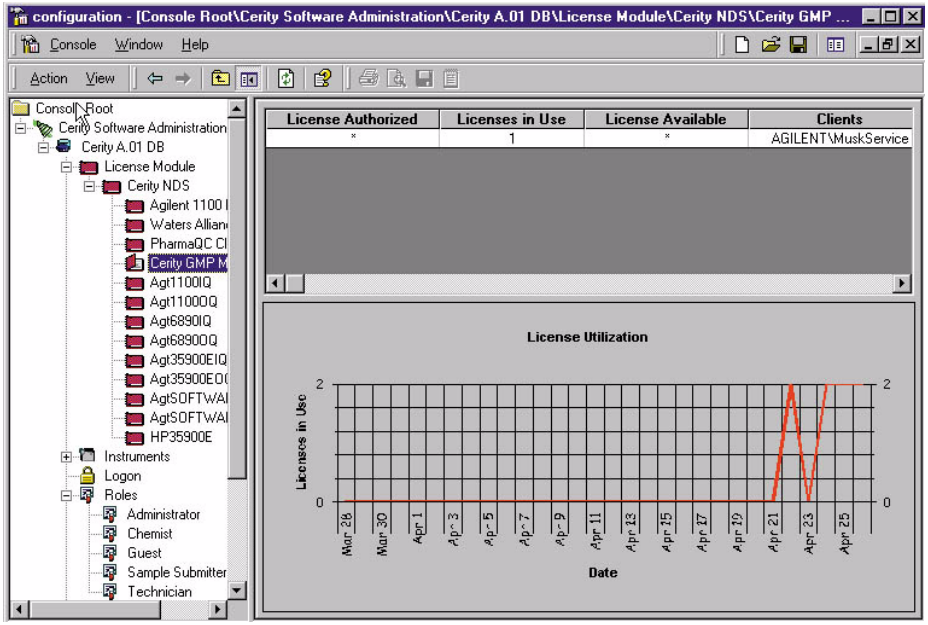


Abb. 51 Lizenzdatenfeld

Hinzufügen von Benutzern

Mit dem Ordner Users (Benutzer) können Sie Benutzer zu Ihrem Cerity NDS hinzufügen.

Sie können:

- Cerity-Benutzer hinzufügen
- Benutzer aktivieren und deaktivieren
- den Benutzern ihre aktuellen Rollen (Current Role) zuweisen
- den Benutzern ihre Überprüfungsrechte (Review Rights) zuweisen
- jedem Benutzer einen Standarddrucker (Default Printer) zuweisen
- Benutzer von einer Datenbank in eine andere kopieren.

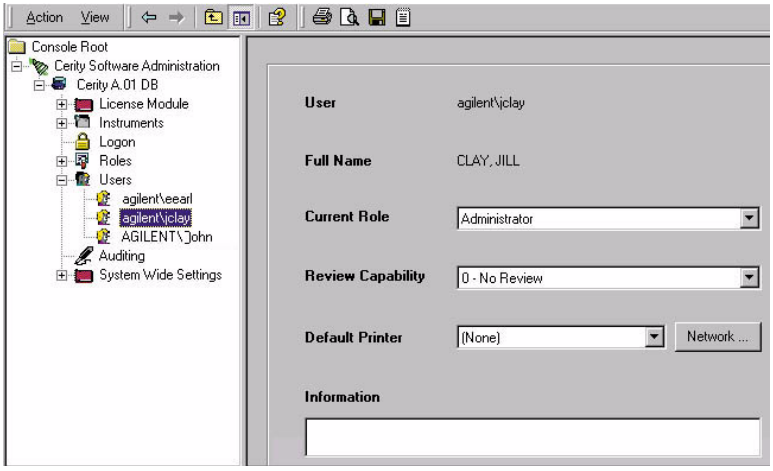


Abb. 52 Ordner Users (Benutzer)

Hinzufügen von Geräten

Den Ordner Instruments (Geräte) benutzen Sie zum Hinzufügen von Steuereinheiten zur Datenaufnahme, logischen Geräten und Zusatzgeräten. Für die Geräte und Zusatzgeräte müssen Sie Parameter in der Anwendung für die pharmazeutische QA/QC eintragen.

Sie können:

- steuereinheiten zur Datenaufnahme hinzufügen und entfernen
- logische Geräte hinzufügen und entfernen
- zusatzgeräte hinzufügen und entfernen
- verbindungseigenschaften von Zusatzgeräten, Geräten und Datenaufnahmeservern ändern
- logische Geräte und verknüpfte Zusatzgeräte in eine andere Steuereinheit verschieben
- ein Gerät anhalten

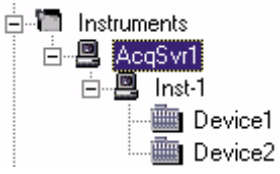


Abb. 53 Ordner **Instruments** (Geräte)

Cerity NDS Systemverwaltung und Wartung

Nachdem die Administratoren die nach der Installation erforderlichen Aufgaben abgeschlossen haben, müssen sie das System warten und haben die Möglichkeit, das Cerity NDS an die Bedürfnisse des Labors anzupassen. Die Systemadministratoren müssen den Gebrauch folgender Cerity NDS Funktionen kennen:

Sicherheit und Audit

Administratoren haben folgende Möglichkeiten, um die Sicherheit des Systems zu gewährleisten:

- Einstellung/Änderung der Sicherheit bei der Anmeldung
- Änderung des Passworts für den Zugang zum Cerity NDS Netzwerkserver-Account und für CAGDbAdmin
- Einschränkung des Zugangs zum Registry-Editor
- Einrichten von Berechtigungen für Cerity NDS und Oracle-Verzeichnisse
- Zuordnung von Rollen an Benutzer, um auf diese Weise den Zugang zu Cerity für pharmazeutische QA/QC zu begrenzen
- Einrichten des Auditing, damit das System die Änderungen, den ändernden Benutzer, das Datum der Änderung und den Änderungsgrund gemäß den Anweisungen in Ihrem Unternehmen aufzeichnet.

Systemweite Formate

Der Administrator kann die numerischen Formate oder das Datums/Zeit-Format für das gesamte Cerity NDS einstellen oder ändern.

Datenbankwartung

Der Administrator kann zur Wartung der Datenbank Folgendes tun:

- Daten archivieren, wiederherstellen oder löschen
- die Datenbank sichern (es kann eine automatische Sicherung eingestellt werden)
- Inkonsistenz der Datenbank nach dem Wiederherstellen von Daten beseitigen.

Systemwartung

Der Administrator kann zur Wartung des Systems Folgendes tun:

- die Einstellungsparameter der Cerity NDS Software-Administration ausdrucken
- Details des Cerity NDS Hostrechners anzeigen
- den Status prüfen und die Cerity NDS Dienste starten oder anhalten

In der Online-Hilfe der Systemverwaltung erhalten Sie Anleitungen zur Durchführung dieser Aufgaben.

Die Konzepte in diesem Abschnitt helfen dem Systemadministrator bei der Durchführung dieser Aufgaben.

Sicherheit und Audit

Anmeldezugang

Der Punkt Logon im Konfigurationsfenster der Cerity Software-Administration steuert den Anmeldezugang zu Ihrem Cerity-Server und den Client-Systemen. Sie können zum Beispiel die Benutzeranzahl festlegen, die sich von derselben Windows Workstation aus beim Cerity NDS anmelden können.

Sie können:

- die Anmeldesicherheit ein- oder ausschalten
- einen Benutzer pro Computer gestatten
- mehrere Benutzer an einem Client-Computer gestatten
- die Leerlaufzeit für eine automatische Anwendungssperre bei Benutzersitzungen an einem gemeinsamen Client-Computer einstellen
- die Cerity NDS Anwendung(en) definieren, die Datenbankzugang haben sollen.

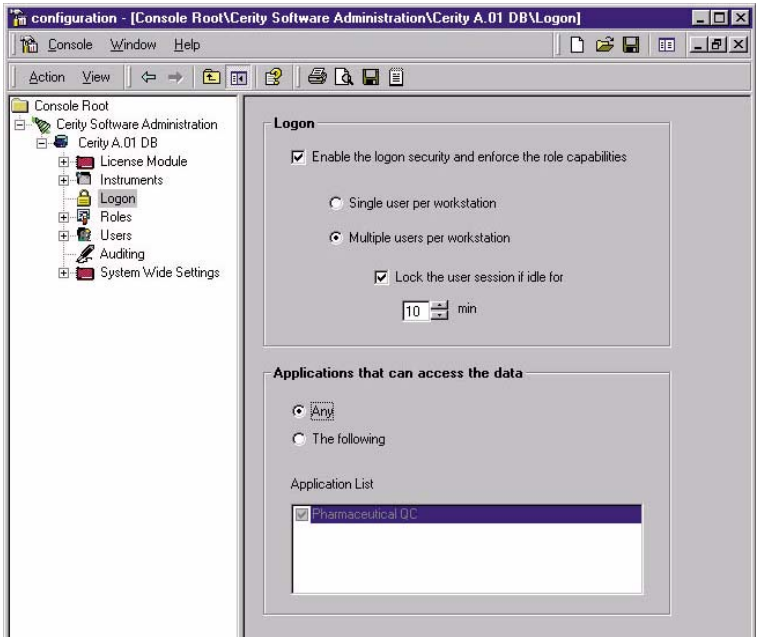


Abb. 54 Anmeldungsdatenfeld

Passwortänderungen

Sie können die Passwörter für den Serverzugang und für die Datenbank im Menü unter Administration and Maintenance ändern. Diese zwei Werkzeuge öffnen Sie vom Startmenü aus. Wenn Sie den Menüpunkt **Change Password** (Passwort ändern) wählen, erscheinen die entsprechenden Dialogfelder.

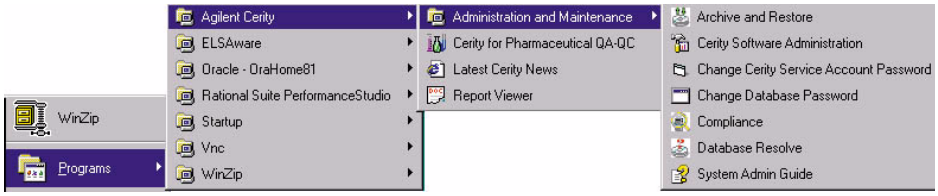


Abb. 55 Menüpunkt Change Password (Passwort ändern)

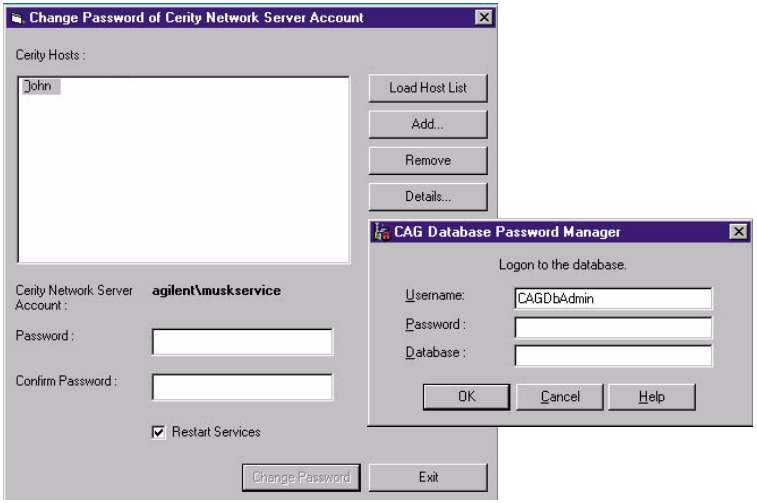


Abb. 56 Dialogfelder Change Password (Passwort ändern)

Berechtigungen für Cerity NDS und Oracle-Verzeichnisse

Die folgende Tabelle zeigt eine kurze Zusammenfassung wichtiger Cerity NDS und Oracle-Verzeichnisse mit den empfohlenen Windows- Zugangsberechtigungen.

Tabelle 8 Windows Verzeichnisberechtigungen

Verzeichnisname	Benutzer oder Gruppe	Empfohlene Genehmigungen
Datenbank (z.B. C:\Database)	EVERYONE	Gruppengenehmigung: Nur Leserechte
	Cerity NDS Administrator	Gruppen- und Dateisystemgenehmigungen: alle Rechte
	Cerity NDS Servicetechniker	Gruppen- und Dateisystemgenehmigungen: alle Rechte
Cerity NDS Registry-Eintrag (HKeyLocalMachine\Agilent\Cerity)	Administratorengruppe; EVERYONE	Gruppen- und Dateisystemgenehmigungen: alle Rechte Gruppengenehmigung: Nur Leserechte
Oracle\Ora81\Bin	SYSTEM	Verzeichnissystem-Berechtigungen: alle Rechte
	Administratorengruppe	Verzeichnissystem-Berechtigungen: Nur Leserechte
Oracle\...\Oradata	SYSTEM	Verzeichnissystem-Berechtigungen: alle Rechte
	Alle anderen Benutzer	Verzeichnissystem-Berechtigungen: Keine
Registry-Eintrag Oracle (HKeyLocalMachine\Software\Oracle	SYSTEM	Verzeichnissystem Berechtigungen: alle Rechte
	Alle anderen Benutzer	Verzeichnissystem-Berechtigungen: Keine
Systemverzeichnis Temp (z.B., C:\Temp), falls bestimmte Dienste nicht starten.	Alle Benutzer	Verzeichnissystem-Berechtigungen: alle Rechte
Cerity\Reports	EVERYONE	Gruppengenehmigung: Nur Leserechte
	• Jeder Windows-Benutzer, der Cerity NDS benutzen möchte • Alle Cerity NDS-Clients • Cerity NDS Administrator	Gruppengenehmigung: alle Rechte
Cerity\Reports\PharmaQC\Templates	EVERYONE	Dateisystem-Berechtigungen: Nur Leserechte
	Jeder Cerity NDS Benutzer, der Reportvorlagen ändern darf	Dateisystem-Berechtigungen: alle Rechte
Cerity\Reports\PharmaQC\pharmaqc.dd (Datenwörterbuch - enthält alle für den Benutzer verfügbaren Felder, Variablen und Ergebnisse)	Alle Benutzer und Gruppen	Dateisystem-Berechtigungen: Nur Leserechte
Cerity\Reports\PharmaQC\Reports	EVERYONE	Dateisystem-Berechtigungen: Nur Leserechte
	Cerity NDS Servicetechniker	Dateisystem-Berechtigungen: alle Rechte

Rollenzuordnung

Im Ordner Roles (Rollen) können Sie den folgenden Standardrollen Aufgabenrechte zuweisen: Systemadministrator, Chemist (Chemiker), Guest (Gast), Sample Submitter (Probenlieferant) und Technician (Techniker).

HINWEIS Standardmäßig verfügt die Rolle Guest über keine Benutzerrechte und bekommt bei der Anmeldung eine leere Applikation gezeigt. Das Einrichten der Gästerolle gehört zum Verantwortungsbereich des Systemadministrators.

Sie können:

- Rollen hinzufügen oder entfernen
- eine Rolle mit ihren Aufgabenrechten von einer Datenbank in eine andere kopieren
- die Aufgabenrechte für eine Rolle ändern

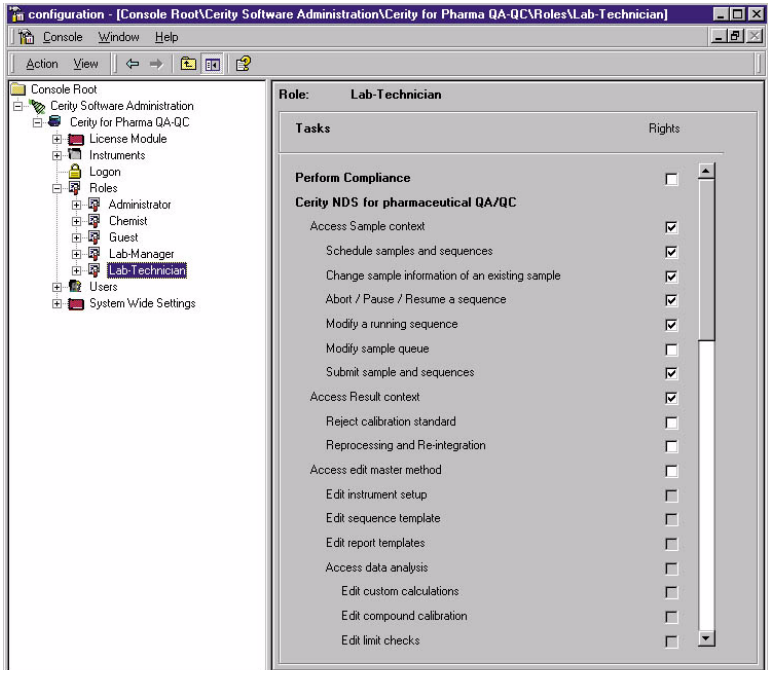


Abb. 57 Ordner Roles (Rollen)

Auditing

Cerity NDS für pharmazeutische QA/QC bietet einen Satz Aufgaben, die die gesetzlichen Richtlinien für das Auditieren elektronischer Aufzeichnungen unterstützen. Der Punkt Auditing ermöglicht das Einrichten der Auditanforderungen für jede Aufgabe.

Sie können:

- von einem Benutzer die Eingabe einer Auditbegründung für eine Aufgabe verlangen
- die Auditgründe eines Benutzers auf die Vorgaben des Cerity NDS Administrators beschränken
- eine elektronische Unterschrift für eine Aufgabe verlangen
- eine Liste mit Auditgründen erstellen
- auditgründe aus der Liste entfernen
- auditanforderungen für eine Aufgabe aktivieren oder löschen

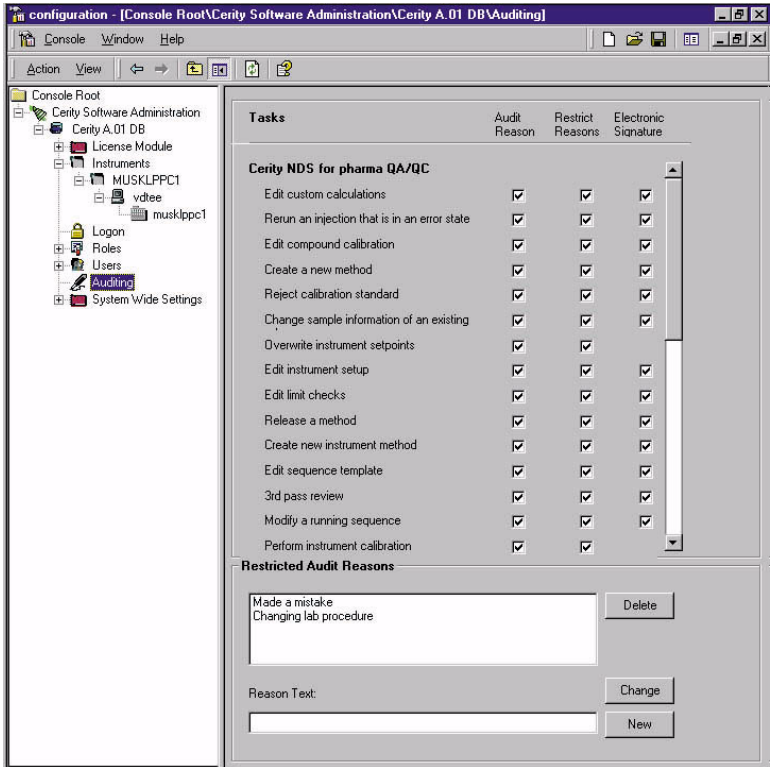


Abb. 58 Datenfeld Auditing

Systemweite numerische Formate und Datumsformate

Mit dem Ordner System Wide Settings (systemweite Einstellungen) können Sie numerische Einstellungen und die Einstellungen für Datum und Zeit festlegen. Die systemweiten Einstellungen beeinflussen die gewählten Feldeinträge oder Ergebniswerte, wie Peakbreite, für die gesamte Cerity NDS Datenbank.

Wählen Sie den Ordner System-Wide Settings, um Folgendes festzulegen:

- die Dezimalstellen von Eingabefeldern und Ergebniswerten, die in Tabellen und Reports erscheinen
- die Notation für das Ersetzen von Zahlen, die größer als die Zelle oder Feldbreite sind
- das Datums- und Zeitformat für Ihre Daten.

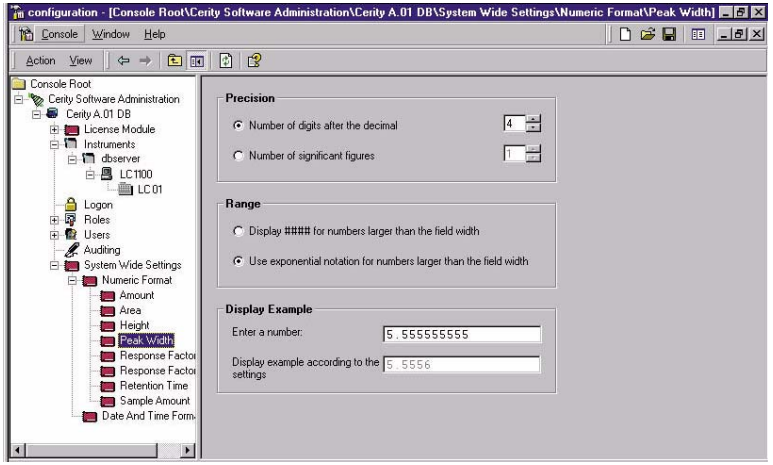


Abb. 59 Ordner System Wide Settings (systemweite Einstellungen)

Datenbankwartung

Archivieren und Wiederherstellen

Mit der Anwendung Archive and Restore können Sie Daten der Datenbank archivieren, wiederherstellen oder löschen. Wählen Sie den Menüpunkt **Archive and Restore** vom Startmenü aus, um das erste Fenster der Anwendung Archive and Restore zu öffnen.

aa

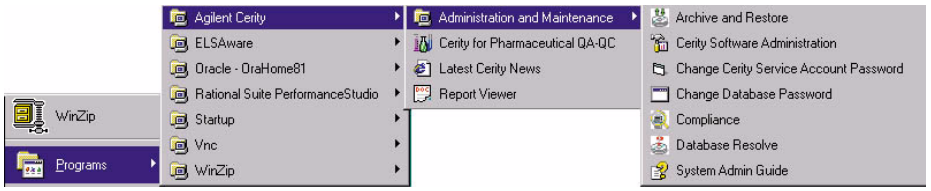


Abb. 60 Menüpunkt Archive and Restore

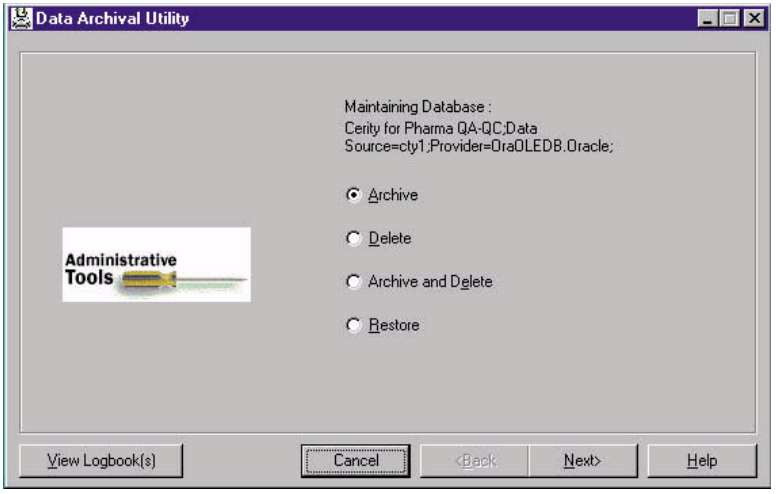


Abb. 61 Erstes Fenster des Hilfsprogramms Data Archival (Datenarchivierung)

Durchsuchen der Datenbank zum Archivieren oder Löschen von "Objekten" Mit dem Cerity NDS Hilfsprogramm Data Archive können Sie Datenbankobjekte, wie eingetragene Proben und Sequenzen, Proben- und Sequenzergebnisse, Geräte- und Methodenangaben, auf einem Archivierungsmedium speichern (Festplatte oder andere Speichermedien). Mit diesem Archivierungsprogramm erstellen Sie eine Langzeitsicherung. Ebenso können Sie mit diesem Programm Daten von einer Datenbank in eine andere überführen. Nachdem Sie die Daten archiviert haben, können Sie die alten Daten aus der Datenbank löschen. Sie müssen Ihre Datenbank in regelmäßigen Abständen straffen, um die Leistungsfähigkeit Ihres Systems zu wahren. Cerity NDS speichert die archivierten Objekte in den Verzeichnissen des Dateisystems von Windows.

Weitere Angaben zum Query Wizard (Abfrageassistenten) finden Sie im Abschnitt "Datenbanksuche" auf Seite 37.

Das Hilfsprogramm Data Archival verwendet für das Suchen der zu archivierenden Objekte denselben **Query Wizard** (Abfrageassistenten), den auch die Anwendung für die pharmazeutische QA/QC einsetzt, um einzurichtende oder zu ändernde Objekte zu suchen.

"Objekte" in der Datenbank wiederherstellen Das Hilfsprogramm Data Archival stellt Objekte aus dem Windows-Dateisystem eines jeden Netzwerklaufwerkes in derselben oder einer anderen Datenbank im Netzwerk wieder her.

Wenn das Hilfsprogramm Data Archival Objekte aus einer Datenbank in eine andere Datenbank wiederherstellt, wird automatisch das Hilfsprogramm Database Resolve gestartet, um eine allfällige Inkonsistenz der Daten zu beseitigen. Falls Duplizitäten vorhanden sind, muss der Benutzer entscheiden, welche Version verwendet werden soll.

Cerity NDS Systemsicherung

Die Cerity NDS Software enthält ebenfalls das Hilfsprogramm Cerity Database Backup and Import. Mit diesem Hilfsprogramm gewährleisten Sie konsistente Sicherungen Ihrer Daten. Das Programm sorgt für die Synchronisierung von Datenbankobjekten und Oracle-Dateien. Im Falle eines Datenverlustes können Sie alle Cerity NDS Daten aus der

Datenbank vor der letzten Sicherung wiederherstellen. Die Cerity-Datensicherung kann während des Betriebs der Datenbank erfolgen. Gelegentliche Pausen im Betrieb haben keinen Einfluss auf laufende Sequenzen. Die Sicherung kann mit dem Hilfsprogramm Cerity Import wiederhergestellt werden.

Agilent empfiehlt, andere Sicherungs-/Wiederherstellungsprogramme, wie zum Beispiel von Veritas Software, für das Erstellen von Sicherungs- oder Wiederherstellungsaufträgen der Datenbankobjekte zu verwenden, und dann mit dem Cerity Sicherungs- und Wiederherstellungsprogramm diese Aufträge auszuführen. Das Cerity-Programm bietet für diesen Zweck eine Befehlszeile an. Mit den Cerity-Hilfsprogrammen können Oracle-Dateien gesichert oder wiederhergestellt werden, wobei sie synchron zu den Cerity-Objektdateien bleiben. Damit können Sie die Sicherungsprogramme und SOPs gemäß den Richtlinien Ihrer Organisation verwenden.

Erstellen Sie gemeinsam mit Ihrem Agilent Cerity NDS Beauftragten passende Zeitpläne für die Sicherung, die Archivierung und das Löschen Ihres Systems.

Lösung bei Konflikten mit Datenbanknamen

Mit dem Hilfsprogramm **Database Resolve** können Sie Konflikte bei Datenbanknamen lösen. Wählen Sie den Menüpunkt Database Resolve aus dem Startmenü, um dieses Hilfsprogramm zu starten.

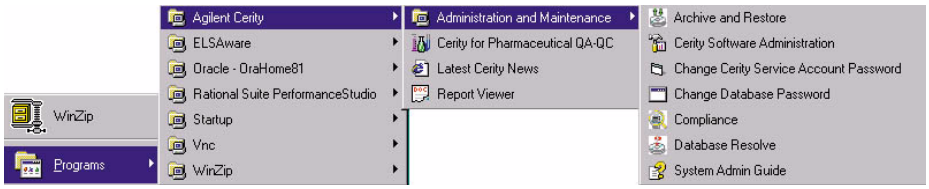


Abb. 62 Menüpunkt Database Resolve

Nachdem sich ein Benutzer angemeldet hat, startet das System das Hilfsprogramm und zeigt entweder die Meldung, dass keine Namenskonflikte gefunden wurden, oder eine Meldung mit den aufzulösenden Namenskonflikten. Wenn doppelte Namen gefunden wurden, können die Benutzer den Namen der Rolle oder des Benutzers auflösen und ein Gerät aktivieren.

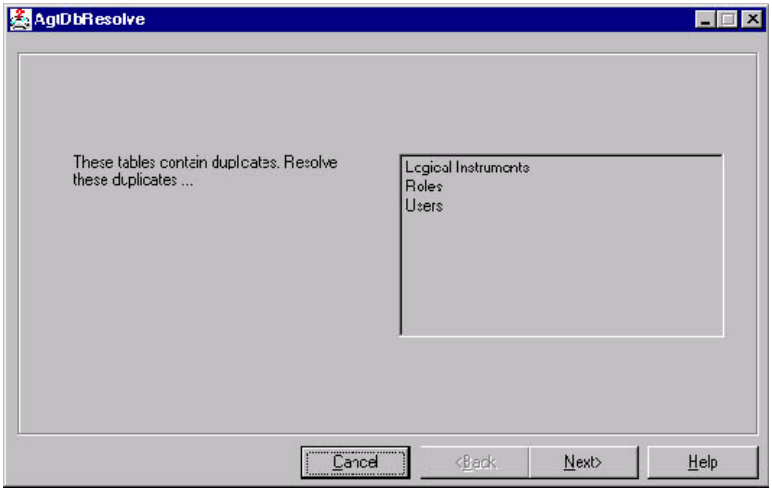


Abb. 63 Fenster Database Resolve

Das Hilfsprogramm Archive and Restore startet beim Versuch, Daten aus einer Datenbank in einer anderen Datenbank wiederherzustellen, automatisch das Hilfsprogramm Database Resolve.

Gesperrte Objekte

Wenn eine Applikation auf ein Objekt, z.B. eine Probe oder eine Methode, in der Datenbank zugreift, wird das Objekt automatisch gesperrt. Sollte das System abstürzen, bleibt die Sperre erhalten und das Objekt bleibt weiterhin für andere Computer im Netzwerk nicht erreichbar. Ein Neustart der Applikation auf dem abgestürzten System stellt in den meisten Fällen das Objekt wieder zur Verfügung. In den Fällen, in denen das Objekt nicht durch den Neustart der Applikation freigegeben wird, hebt die Ausführung eines der Befehle in der Abfrage *lockedobjects.sql* die Objektsperre wieder auf.

Index

A

Abfrage
  daten zur Überprüfung, 16
  ergebnisse, 37
  für jede Ansicht, 38
  liste, 26
  standard, 37
  tools, 16
Abfrageassistent, 26
Ablaufschema
  einstellen von Methodenparametern, 96
  report einrichten, 135
  routineproben analysieren, 50
Administrator, 14, 17, 158
Agilent Chemstation Datei, 63
Aktuelle Ansicht, 22, 26
Analysenläufe einplanen, 55
Änderungen in der Datenbank speichern, 40
ANDI- Datei, 63
Anfängliche ereignisse, 105
Angaben zu Einzelproben
  in die Tabelle einfügen, 53
Anmeldung
  benutzereinrichtung, 156
  datenbankzugang, 156
  sicherheit, 156
  sitzungsleerlaufzeit, 156
Ansicht
  ergebnis, 24
  methode, 25
Arbeitsbereich, 28
Arbeitsblatt, 118, 129
Arbeitsblattbeziehungen, 129 to 131
Arbeitsliste
  aufgaben, 56
  proben und Sequenzen verfolgen, 56
  status des Laufes, 35
Archivieren, 14, 155, 163
Audit
  sample Logbook, Probenlogbuch, 41
  sequenzlogbuch, 41
Auditing
  anforderungen, 160
  aufgaben wählen, 40
  elektronische unterschrift, 160
  für eine Änderung, 154
  für eine Aufgabe, 160
  gründe, 154, 160
Audittrail
  regelwerk, 19
  revisionskontrolle, 19
Aufgabenrechte, 158
Aufgabenzuordnung, 158
Authentifizierung, 19

B

Basismethode, 97
Bedingte Anweisungen, 123
Beispielchromatogramm
  datenanalyse, 104
  erzeugen, 104
  verwendung, 104
Benutzer
  aufgabe zuweisen, 152
  hinzufügen, 152
  rechte überprüfen, 152
Benutzerausweiskarte, 19
Benutzerdefiniert
  ergebnisse, 120
  variablen, 120
Benutzerdefinierte Berechnungen
  andere Beispiele, 129
  arbeitsblatt, 118
  beispiel, 124 to 128
  bestehende Variablen, 119
  datenanalyse, 106
  einrichten, 115, 124
  ergebnisarten, 115
  ergebnistyp, 119
  erzeugen, 116
  neue Formel, 119
  neuerstellung, 120
  spalten hinzufügen, 119
Benutzerdefinierte Probenvariablen, 103, 119
Benutzerdefinierter Rechner
  probengruppe, 123
Benutzereinrichtung, 156
Benutzerlizenz, 8
Berechnungsarbeitsblatt, 118, 129
Berechnungsstufen
  einzelinjektion, 121
  probentypgruppe, 123
  über, 121
  zusammenfassung der Mehrfachinjektion, 122
Berechtigter Zugriff, 17
Berechtigungen, 157
Berechtigungsprüfungen, 17
Bestehende Variablen, 119
Betrachten
  aktuell, 22
  probe, 22
Betriebsqualifizierung, 18

C

Cerity
- abfragetools, 16
- administrator, 14, 17
- audittrail, 19
- datenbank, 16
- datenbankserver, 11
- module, 11
- reports, 158
- review Client, 11, 14
- sicherheit, 17
- steuereinheit für die Datenaufnahme, 11
- vorlagen, 158

Cerity Client/Server System, 8
Cerity Database Resolve, 14
Cerity Hilfsprogramm Archive and Restore, 163
Cerity NDS
- benutzer, 148

Cerity NDS Dienste, 155
Cerity Professional System, 8
Cerity Report Viewer
- betrachten, 13
- drucken, 13

Cerity Reportvorlageneditor
- erreichen, 47
- reportvorlagen erstellen, 13

Cerity Software Administration
- datenbank hinzufügen, 150
- einstellungsparameter, 155
- konfigurationswerkzeuge, 149

Cerity Software-Verwaltung
- über, 14

Cerity-Reportbetrachter
- gespeicherte Reports, 145

Cerity-Reportvorlageneditor
- registerkarte Fields, 139
- registerkarte Sections, 139
- registerkarte Template, 139
- texteditor, 142
- vorlagen ändern, 139
- vorlagen erstellen, 139
- werkzeuge, 139

Channelpartner, 18
Chemiker, 158
Compliance (Einhaltung geltender Bestimmungen), 14
Compliance-Programm, 18

D

Data Review Layout
- ergebnistabellen, 107
- vorschau, 133

Daten
- abrufen, 16
- archivieren, 18
- arten, 22
- beschädigung, 18
- inkonsistenz, 18
- löschen, 155, 163
- objekte, 18
- rückverfolgbarkeit, 19

Daten abrufen, 16
Datenanalyse
- beispielchromatogramm, 104
- benutzerdefinierte Berechnungen, 106
- grenzwerte, 107
- identifizierung, 105
- integration, 105
- kalibrierung, 106
- quantifizierung, 106

Datenaufnahme, 11
Datenaufnahmeserver, 153
Datenbank
- hinzufügen, 150
- inkonsistenz, 165
- konfigurationswerkzeuge, 150

Datenbankserver, 11
Datenbankwartung, 155
Datenwörterbuch, 158
Datum- und Zeitformat, 154
Dezimalstellen, 162
Durchzuführende Aufgaben, 51

E

Echtzeitgrafik, 54
Eine Probe starten, 34
Eine Sequenz starten, 34
Einfache Aktualisierung der Kalibrierung, 109, 110
Einhaltung geltender Bestimmungen (Compliance), 17
Einheiten
- istwerte, 54

Einstufige Kalibrierung, 108
Einzelne Aktualisierung der Kalibrierung, 75
Einzelprobeneintrag
- geräteansicht, 51
- probenansicht, 51

Elektronische Aufzeichnungen, 160
Elektronische Unterschrift
- änderungsgrund, 40
- anforderungen, 40
- auditing, 160
- authentifizierung, 19
- berechtigungsausweise, 19
- zeitstempel, 19

Equilibrieren
- gerät, 54
- säule, 54

Equilibrierungsparameter, 54
Ergebnis
- abfrage, 58
- ansicht, 24, 36
- erweiterte Überprüfung, 12
- suchen, 58
- überprüfung, 36

Ergebnisse, 11
  ablehnen, 64
  automatisch integrieren, 72
  darstellungsart, 132
  felder, 133
  genehmigen, 64
  genehmigen/zurückweisen, 63
  layoutarten, 132
  neuberechnung, 63
  peakintegration, 119
  quantifizierung, 119
  substanzintegration, 119
  überprüfung, 63
  variablen, 133
Ergebnisse erneut auswerten, 67
Ergebnisversion, 73

F

Felder, 46
Fenster Instrument
  module, 54
  parameter eingeben, 54
Funktionen, 123

G

Gast, 158
Gerät
  ansicht, 34
  einrichten, 102, 153
  methode, 97
  säule, 54
Gerätelogbuch, 57
Geräteparameter
  eingestellte Werte, 54
  tatsächliche Werte, 54
Geräteprüfungen, 18
Gerätespezifische Kalibrierung, 114
Gesamtkalibrierung, 109
Gesamtklammerkalibrierung, 77, 113
Gesperrte Objekte, 166
Grenzwerte
  datenanalyse, 107
  einrichten, 107
  ergebnisarten, 107

H

Hilfemenü, 29
Hilfsprogramm Database Resolve, 164

I

Individuelle Reportvorlagen
  einheit, 140
  einzelinjektion, 140
  methode, 140
  neuen Report speichern, 140
  übereinstimmung, 140
Installationsqualifizierung, 18
Integration
  anfängliche Ereignisse, 105
  chromatogramm wechseln, 105
  datenanalyse, 105
  zeitgesteuerte Ereignisse, 105
Integrationswerkzeuge, 72
IQ, 18
Istwerte der Einheiten, 54

K

Kalibrieraktualisierung, 51
Kalibrierart
  einstufig, 108
  mehrstufig, 108
Kalibrierstandards
  mittelwert, 110
  responsefaktor, 108
Kalibrierung
  datenanalyse, 106
  einfache Aktualisierung, 110
  einrichten, 106
  einzelne Aktualisierung, 75
  feste Menge, 109
  gesamtklammerbildung, 77, 113
  klammerbildung, 76, 111
  probe, 108
  responsefaktor, 106, 110, 111
  retentionszeiten, 110
  standards, 106
  stufe, 108
  tabelle, 110
  variable Menge, 109
Kalibrierverfahren
  gerätespezifische Kalibrierung, 114
  sequenzspezifische Kalibrierung, 114
Klammerbildung, 109
Klammerkalibrierung, 76, 111
kombinierte Reportvorlagen
  mehrfachinjektion, 140
  sequenz, 140

L

Lauf
  abbrechen, 55, 56
  ablaufregeln, 55
  eine Sequenz stoppen, 56
  einzelproben, 55
  ereignisse aufzeichnen, 57
  fortsetzen, 56
  pause, 56
  reihenfolge, 55
  sequenz, 55
  sequenzbearbeitung, 56
  unterbrechen, 55
  warteschlange, 56
Lauf unterbrechen, 55
Leistungsvalidierung, 18

Lizenz
  berechtigung, 151
  erweitern, 151
  hinzufügen, 151
  verwendung, 151
Lizenz erweitern, 151
Logbuch
  methode, 41
  probe, 62
  sequenz, 53
Logische Geräte, 153
Löschen von Daten, 14

M

Mathematische Funktionen, 123
Mehrfachinjektionsvorlagen, 140
Mehrstufige Kalibrierung, 108
Menü mit Kurzbefehlen, 28
Method Logbook, Methode
  logbuch, 41
Methode
  alte Versionen, 100
  ansicht, 25
  basis, 97
  beschreibung, 100
  data Review Layout, 132
  erzeugen, 44
  freigabe, 97
  logbuch, 100
  parameter, 44
  reporterstellung, 107
  über, 101
  versionen, 100
  vorlage, 44
  zugeordnete Einträge, 99
  zugeordnete Ergebnisse, 99
Methode freigeben, 97
Methodenassistent, 44
Methodenerstellung
  ablaufschema, 96
  benutzerdefinierte Berechnungen, 12
  datenanalyse, 12
  einzelproben, 98
  ergebnisdarstellung, 12
  gerät, 12
  grenzwert, 12
  optionen, 44
  reportausgabeeinheit, 137
  reporterstellung, 13
  reporttyp, 12
  sequenzen, 98
Methodenunterschiede, 98
Methodenvariablen, 120

N

Nachkalibrierung, 108
Nachvollziehbarkeit, 78
Neuauswertung
  aktion, 67
  optionen, 67
Neubearbeitung
  server, 11
NT Workstation, 8, 11
Numerische Formate, 154

O

Objekte, 22
OQ/PV, 18

P

Parameter
  datenanalyse, 39
  gerät, 39
  methode, 44
  reporterstellung, 45
Passwort, 14, 154, 157
Passwort ändern, 157
Peakintegration, 119
Peaksummierung, 105
Probe
  betrachten, 22
  eingabe, 25
  lauf, 34, 35
  status, 35
Probenanalyse, 12
Probeneintrag
  fenster, 32
  informationen in die Tabelle übertragen, 52
  informationen speichern, 52
  ordner, 32
  reportausgabeeinheit, 137
Probengruppenrechner, 123
Probenlieferant, 12, 158
Probenlogbuch, 62
Probenmenge
  ändern, 52
Probenvariable
  ändern, 103
  system, 102
Probenvariable Menge
  divisoren, 52
  multiplikatoren, 52
Probenvariablen, 39, 119
  benutzerdefinierte, 103

Q

Quantifizierung
  datenanalyse, 106
  ergebnisse, 119
  nicht identifizierte Peaks, 106
  nicht kalibrierte Substanzen, 106
QuickInfos, 29, 30

R

Registerkarte Fields, 143
Registerkarte Sections, 143
Registerkarte Template, 139
Registrierung, 154
Reintegrieren
  anfängliche Ereignisse, 72
  zeitgesteuerte Ereignisse, 72

Relationale Datenbank, 11
Reportausgabeeinheit, 52, 53, 137
Reportbestandteile
  mehrfachinjektionsvorlagen, 140
  sequenzvorlagen, 141
Reporterstellung, 45
Reports
  ablaufschema, 135
  ansehen oder drucken, 135
  einrichten, 135
  erzeugen, 135
  forrmat, 142
Reporttyp
  auswahl, 45
  drucken, 45
  erzeugen, 45
  standard, 45
Reporttypen
  für eine Einzelprobe, 136
  für eine Sequenz, 136
  methode erstellen, 136
Reportvorlage
  ändern, 46
  daten abrufen, 13
  druckoptionen, 144
  elemente einfügen, 143
  erstellen, 46
  erstellen von Bestehendem, 142
  erzeugen, 139
  felder, 13
  formatoptionen, 144
  neu, 46
  optionen speichern, 144
  speicheroptionen, 144
  standard, 46
  tabellen, 13
Responsefaktor, 106, 108, 110, 111
Retentionszeiten, 110
Review Client, 14, 15
Rohdaten, 11
Rollen
  administrator, 158
  chemiker, 158
  gast, 158
  probenlieferant, 158
  techniker, 158
Routineproben
  ablaufschema, 50
  lauf, 50
Rückverfolgbarkeit, 19

S

Schalter Neu, 26
Schaltfläche
  abbrechen, 56
  entfernen, 56
  fortsetzen, 56
  pause, 56
Sequence Logbook,Sequenzlogbuch, 42
Sequenz
  bearbeitung während des Laufes, 56
  einrichten, 25
  erstellen, 32
  fortsetzen, 35
  halt, 35
  lauf, 34, 35, 55
  pause, 35
  status, 35
  zuordnen, 32
Sequenzeingabe
  geräteansicht, 52
  probenansicht, 52
Sequenzlogbuch, 53
Sequenzoptionen
  durchzuführende Aufgaben, 53
  reportausgabeeinheit, 53
sequenzspezifische Kalibrierung, 114
Sequenzvorlage, 39, 104
  probenansicht, 32
Sequenzvorlagen, 141
Serviceingenieur, 18
Sicherheit
  anmeldung, 154, 156
  aufgaben, 154
  berechtigter Zugriff, 17
  passwort ändern, 154
  verzeichnisberechtigungen, 154
Signalzeiten hinzufügen, 105
Sitzungsleerlaufzeit, 156
Standarddrucker, 152
Standardreporttypen, 45
Standardreportvorlage, 13
Standards, 106
Steuereinheit zur Datenaufnahme, 15
Strukturansicht, 26
Substanzidentifizierung
  hinzufügen oder Entfernen, 105
Substanz-Kalibriertabelle, 108
Symbolleiste
  aktion, 26
  bearbeiten, 28
  hilfe, 26, 29
  standard, 26
Systemeignung
  einrichten, 134
  ergebnisse, 134
  injektionen, 112
  werte, 134
System-Probenvariablen, 102
Systemweite Formate
  datum und zeit, 154, 162
  numerisch, 154, 162

T

TCSP, 18
Techniker, 158

U

Überprüfung der Ergebnisse
  einzelproben, 61
  sequenz, 62
Überprüfungsberechtigung, 65

Überprüfungsmodus
keine strenge Überprüfung, 65
strenge Überprüfung, 65
Überprüfungsstatus
akzeptiert, 66
nachbearbeitung erforderlich, 66

V

Validierungsservice, 18
Variablen
benutzerdefinierte Probe, 119
methode, 119
probe, 119
probentypgruppe, 120
Variablen von Probentypgruppen, 120
Verband, 9
Verbindungseigenschaften, 153
Versionen
alt, 100
alte, 78
methode, 100
Versionen der Kalibriertabelle, 75 to 77
Versionskontrolle, 19
Versionsnummer
ergebnisversion, 73
erhöhen, 73
Verzeichnisberechtigungen, 157
Vorlage
methode, 44
report, 39
sequenz, 39

W

Warteschlange, 56
Wiederherstellen, 14, 155, 163

X

XML-Datei, 141

Z

Zeitgesteuerte ereignisse, 105
Zusatzgeräte, 153
Zwischenwerte, 11

www.agilent.com

In diesem Handbuch

Der Konzeptleitfaden erläutert die Grundzüge des Cerity Networked Data System (NDS) für die pharmazeutische QA/QC, damit Sie:

- die Cerity NDS Module einzusetzen verstehen
- die Online-Hilfe möglichst effizient nutzen können

Dieser Leitfaden enthält folgende Informationen:

- Übersicht über die Grundlagen Ihres Cerity NDS
- Grundlagen von Cerity für pharmazeutische QA/QC
- Konzepte für die Probenanalyse
- Konzepte für die Methodenerstellung
- Programme zur Verwaltung und Systemwartung

© Agilent Technologies Deutschland GmbH 2003

Gedruckt in Deutschland
5/2003

G4000-92023

Agilent Technologies